

*Научный совет РАН  
по физике конденсированного состояния  
Институт физики твердого тела РАН*

**III Международная конференция  
ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ  
ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ**

**1-3 июня 2004**

**ПРОГРАММА И ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ**



**Черноголовка 2004**

# **Конференция ФВД-2004 организуется**

*Научным советом РАН  
по физике конденсированного состояния,  
Институтом физики твердого тела РАН*

**и проводится на базе**

*Института физики твердого тела РАН,  
г. Черноголовка Московской области*

**при поддержке**

*Министерства образования и науки РФ,  
Российского фонда фундаментальных исследований.*

## **ОРГКОМИТЕТ:**

- Ю.А. Осипьян (ИФТТ РАН) – председатель**
- В.Е. Фортов (ИТЭС РАН) – зам. председателя**
- Л. Дубровинский (Университет Байройта, Байройт)**
- Г.И. Канель (ИПХФ РАН)**
- Ю.А. Литвин (ИЭМ РАН)**
- Е.Г. Понятовский (ИФТТ РАН)**
- С.М. Филипек (ИФХ ПАН, Варшава)**

**Ученый секретарь:**

**И.О. Башкин (ИФТТ РАН)**  
**<bashkin@issp.ac.ru>**

*RAS Scientific Council  
On Physics of Condensed State  
Institute of Solid State Physics RAS*

**III International Conference**

**Phase Transformations  
under High Pressure**

**June 1–3, 2004**

**Program and Abstracts**



**Chernogolovka 2004**

**Held at**

***Institute of Solid State Physics RAS,  
Chernogolovka, Moscow district***

**Supported by**

***Ministry of Education and Science RF,  
Russian Foundation for Basic Research***

**Organizing Committee:**

**Yu.A. Ossipyan (ISSP RAS) – *Chairman***

**V.E. Fortov (IHED RAS) – *Vice-Chair***

**L. Dubrovinsky (University Bayreuth, Bayreuth)**

**G.I. Kanel (IPCP RAS)**

**Yu.A. Litvin (IEM RAS)**

**E.G. Ponyatovsky (ISSP RAS)**

**S.M. Filipek (IPC PAS, Warsaw)**

***Conference Secretary:***

**I.O. Bashkin (ISSP RAS)**

**<bashkin@issp.ac.ru>**

## ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ

<u>Нормальное расписание пансионата:</u> <i>завтрак</i>	<b>9<sup>00</sup>–10<sup>00</sup></b>
<i>обед</i>	<b>14<sup>00</sup>–15<sup>00</sup></b>
<i>полдник</i>	<b>17<sup>00</sup>–17<sup>30</sup></b>
<i>ужин</i>	<b>18<sup>45</sup>–19<sup>30</sup></b>

### *Вторник 1 июня*

<b>9<sup>00</sup>–9<sup>30</sup></b>		<i>Завтрак</i>
<b>9<sup>40</sup>–11<sup>30</sup></b>	1 заседание; председатель Е.Г. Понятовский	
<b>9<sup>30</sup>–9<sup>40</sup></b>	Приветственное слово – ак. <b>Ю.А. Осипьян</b>	
<b>9<sup>40</sup>–10<sup>10</sup></b> О-30	<b>Ю.А. Осипьян</b> Фуллерены под высоким давлением	
<b>10<sup>10</sup>–10<sup>40</sup></b> О-25	<b>Е.Г. Максимов</b> , М.В. Магницкая, В.Е. Фортов Непростое поведение простых металлов при высоких давлениях	
<b>10<sup>40</sup>–10<sup>55</sup></b> О-4	<b>С.С. Бацанов</b> Новый метод нагружения: динамико-статическое сжатие	
<b>10<sup>55</sup>–11<sup>15</sup></b> О-15	<b>Ф.С. Елькин</b> , О.Б. Циок, Л.Г. Хвостанцев Кинетика фазовых превращений при высоких давлениях. Тензометрический метод исследования	
<b>11<sup>15</sup>–11<sup>30</sup></b> О-45	<b>А.Э. Хейфец</b> , В.И. Зельдович, Н.Ю. Фролова, Б.В. Литвинов, Н.П. Пурьгин Изучение рассеяния ударных волн на микронеоднородностях среды на основе анализа микроскопических особенностей остаточной деформации нагруженных образцов	
<b>11<sup>30</sup>–12<sup>00</sup></b>		<i>Кофе</i>

<b>12<sup>00</sup>–14<sup>00</sup></b>	2 заседание; председатель Ю.А. Литвин	
<b>12<sup>00</sup>–12<sup>30</sup></b> О-6	<b>S.G. Buga</b> , V.D. Blank, G.A. Dubitskiy, K.V. Gogolinskii, V.M. Prokhorov, N.R. Serebryanaya, B. Sundqvist, Å. Fransson Physical Characterization of Crystalline 3D-Polymeric C <sub>60</sub> and C <sub>70</sub> Fullerenes Obtained by High-Pressure-High-Temperature Treatment	
<b>12<sup>30</sup>–12<sup>50</sup></b> О-8	Ю.Ф. Бирюлин, П.Н.Брунков, <b>А.Я.Вуль</b> , А.Т.Дидейкин, Б.Г. Жуков, С.В. Кидалов, М.Н.Корытов, А.В.Нащекин, С.И.Розов, З.Г.Царёва, Ф.М. Шахов, М.А.Яговкина Воздействие динамических давлений на наноуглеродные объекты	
<b>12<sup>50</sup>–13<sup>10</sup></b> О-22	<b>А.В. Курдюмов</b> , В.Ф. Бритун, Н.И. Боримчук, А.И. Даниленко, В.В. Ярош Фазовые превращения разупорядоченных графитоподобных структур при высокотемпературном ударном сжатии	
<b>13<sup>10</sup>–13<sup>30</sup></b> О-12	<b>В.Ф. Дегтярева</b> Деформация Бейна <i>гик–оцк</i> в бинарных сплавах на основе In и Sn: определяющая роль валентных электронов	
<b>13<sup>30</sup>–13<sup>45</sup></b> О-2	<b>А.Н. Бабушкин</b> , Я.Ю. Волкова, О.В. Нарыгина, С.Н. Шкерин, Е.Д. Образцова Комплексное сопротивление одностенных углеродных нанотрубок при давлениях до 50 ГПа	
<b>13<sup>45</sup>–14<sup>00</sup></b> О-10	<b>М.И. Даунов</b> , И.К. Камилов, С.Ф. Габибов О природе “тяжелых” электронов в бесщелевых и узкозонных полупроводниках CdHgTe <i>p</i> -типа по исследованиям электронного транспорта в критической области при высоких давлениях	
<b>14<sup>00</sup>–15<sup>00</sup></b>		<i>Обед</i>

15 <sup>00</sup> –17 <sup>00</sup>	3 заседание; председатель Г.И. Канель
15 <sup>00</sup> –15 <sup>30</sup> O-47	<b>К.И. Шмулович</b> Флюидные системы при высоких давлениях и температурах
15 <sup>30</sup> –16 <sup>00</sup> O-39	<b>Р.Ф. Трунин</b> Сжатие веществ сверхвысокими давлениями ударных волн
16 <sup>00</sup> –16 <sup>20</sup> O-3	<b>Д.Д. Бадюков</b> , Й. Райтала Высокобарные фазы в метеоритах
16 <sup>20</sup> –16 <sup>40</sup> O-11	<b>О. Degtyareva</b> , E. Gregoryanz, H-K. Mao, R.J. Hemley Novel Chain Structures in Group VI Elements
16 <sup>40</sup> –17 <sup>00</sup> O-26	<b>К.П. Мелетов</b> , И.О. Башкин Энергетический спектр и стабильность гидрида фуллерена C <sub>60</sub> H <sub>36</sub> при давлении до 12 ГПа
17 <sup>00</sup> –17 <sup>30</sup>	<i>Полдник</i>
17 <sup>30</sup> –21 <sup>30</sup>	Стендовая сессия – доклады P-1 – P-30

*Среда 2 июня*

9 <sup>00</sup> –9 <sup>30</sup>	<i>Завтрак</i>
9 <sup>30</sup> –11 <sup>30</sup>	4 заседание; председатель Е.Г. Максимов
9 <sup>30</sup> –10 <sup>00</sup> O-42	<b>S.M. Filipek</b> , V. Paul-Boncour, H. Sugiura, R.S. Liu and I. Marchuk Properties of Novel Hydrides Synthesized under High Hydrogen Pressures from C15 Laves Phases
10 <sup>00</sup> –10 <sup>20</sup> O-37	<b>В.В. Стегайлов</b> Исследование свойств перегретых кристаллов методом молекулярной динамики
10 <sup>20</sup> –10 <sup>40</sup> O-31	<b>В.И. Постнов</b> , В.Е. Фортов, В.В. Якушев, И.В. Ломоносов, К.Л. Каган, Д.В. Шахрай, В.В. Авдонин Электропроводность лития, натрия, кальция и алюминия в условиях ступенчатого сжатия до 2 Мбар
10 <sup>40</sup> –11 <sup>00</sup> O-36	<b>А.В. Спивак</b> , С.Н. Шилюбеева, Ю.А. Литвин Формирование алмаза в многокомпонентных карбонат–углеродных средах: граничные условия, кинетика, примесный азот
11 <sup>00</sup> –11 <sup>20</sup> O-29	<b>A.R. Oganov</b> Phase Diagrams of Minerals from <i>ab initio</i> Simulations
11 <sup>30</sup> –12 <sup>00</sup>	<i>Кофе</i>

12 <sup>00</sup> –14 <sup>00</sup>	5 заседание; председатель S.M. Filipek
12 <sup>00</sup> –12 <sup>30</sup> O-14	<b>L.S. Dubrovinsky</b> , N.A. Dubrovinskaja Chemical Reactions at Extreme Conditions: Approaching Earth Major Interface
12 <sup>30</sup> –12 <sup>45</sup> O-24	М.М. Кириллова, Л.В. Номерованная, А.В. Махнёв, <b>М.В. Магницкая</b> , А.В. Цвященко, Л.Н. Фомичева Оптические свойства соединения CaCo <sub>2</sub> , синтезированного при высоком давлении. Эксперимент и теория
12 <sup>45</sup> –13 <sup>05</sup> O-5	<b>М.С. Блантер</b> , В.П. Глазков, В.А. Соменков Тепловые колебания и полиморфизм металлов
13 <sup>05</sup> –13 <sup>20</sup> O-18	<b>И.П. Зибров</b> , В.П. Филоненко, С.В. Гармаш, М. Сундберг, П.-Э. Вернер Структура фаз высокого давления V <sub>2</sub> O <sub>5</sub>

13 <sup>20</sup> –13 <sup>35</sup> O-13	<b>П.И. Дорогокупец</b> , А.Р. Оганов Рубиновый стандарт давления и его альтернативы
13 <sup>35</sup> –13 <sup>50</sup> O-21	А.Я. Вуль, В.М. Давиденко, <b>С.В. Кидалов</b> , Ф.М. Шахов, М.А. Яговкина, В.А. Яшин Каталитическое влияние фуллеренов на синтез алмазов из графита
14 <sup>00</sup> –15 <sup>00</sup>	<i>Обед</i>

15 <sup>00</sup> –17 <sup>00</sup>	6 заседание; председатель Л. Дубровинский
15 <sup>00</sup> –15 <sup>30</sup> O-19	<b>Г.И. Канель</b> , С.В. Разоренов, Г.С. Безручко Физика отрицательных давлений: современное состояние и задачи
15 <sup>30</sup> –15 <sup>50</sup> O-35	<b>В.А. Соменков</b> Атомные колебания и фазовые переходы при высоких давлениях и температурах
15 <sup>50</sup> –16 <sup>05</sup> O-7	<b>Ю.Г. Бушуев</b> , С.В. Давлетбаева, Т.А. Дубинкина Компьютерное моделирование процессов кристаллизации воды
16 <sup>05</sup> –16 <sup>20</sup> O-27	<b>А.Ю. Моллаев</b> , Р.К. Арсланов, Л.А. Сайпулаева, С.Ф. Габитов Структурные фазовые переходы в некоторых бинарных полупроводниках при высоком давлении
16 <sup>20</sup> –16 <sup>35</sup> O-17	И.В. Хомская, <b>В.И. Зельдович</b> , Б.В. Литвинов, Н.П. Пурыгин Фазовые превращения и эффекты локализации деформации в сплавах при нагружении сходящимися ударными волнами
16 <sup>35</sup> –16 <sup>50</sup> O-16	<b>M.I. Eremets</b> , A.G. Gavriiliuk, I.A. Trojan, M.Yu. Popov, D.A. Dzivenko, R. Boehler Polymeric Nitrogen
16 <sup>50</sup> –17 <sup>05</sup> O-23	<b>А.В. Курнос</b> ов, А.Ю. Манаков, В.Ю. Комаров, В.И. Воронин, А.Е. Теплых, С.В. Горяинов, А.Ю. Лихачёва Клатратные фазы высокого давления в системе тетрагидрофуран – вода. Новый структурный тип клатратных гидратов
17 <sup>00</sup> –17 <sup>30</sup>	<i>Полдник</i>
17 <sup>30</sup> – 21 <sup>30</sup>	Стендовая сессия – доклады P-31 – P-62

#### **Четверг 3 июня**

9 <sup>00</sup> –9 <sup>30</sup>	<i>Завтрак</i>
9 <sup>30</sup> –11 <sup>30</sup>	7 заседание; председатель К.И. Шмулович
9 <sup>30</sup> –9 <sup>50</sup> O-1	<b>I.A. Abrikosov</b> First-Principles Simulations of Alloy Thermodynamics at High Pressure
9 <sup>50</sup> –10 <sup>05</sup> O-40	<b>А.П. Тютюнник</b> , Н.В. Таракина, В.Г. Зубков, Т.В. Дьячкова, Ю.Г. Зайнулин, Г. Свенссон Исследование полиморфизма в ниобатах и танталатах 3d-переходных элементов в условиях высоких давлений и температур
10 <sup>05</sup> –10 <sup>20</sup> O-33	<b>Г.В. Синько</b> , Н.А. Смирнов Потеря кристаллом $\alpha$ -железа механической устойчивости в области отрицательных давлений
10 <sup>20</sup> –10 <sup>35</sup> O-38	Е.Б. Долгушева, <b>В.Ю. Трубицын</b> , Е.И. Саламатов Моделирование фазовых переходов в цирконии методом молекулярной динамики

10 <sup>35</sup> –10 <sup>50</sup> O-20	<b>А.Н. Катруша</b> , О.А. Заневский, С.А. Ивахненко Влияние высоких давлений и температур на дефектно-примесный состав монокристалла алмаза
10 <sup>50</sup> –11 <sup>05</sup> O-32	<b>М.А. Серга</b> , С.А. Ивахненко Стимулирование гетерогенного зародышеобразования при выращивании монокристаллов алмаза в области термодинамической стабильности
11 <sup>05</sup> –11 <sup>20</sup> O-46	<b>А.В. Цвященко</b> , Л.Н. Фомичева, М.А. Авила, С.Л. Будько, Р.А. Рибейро, П.К. Кенфилд, К. Петровик Синтез диборидов РЗМ при высоком давлении. Магнетизм YbB <sub>2</sub>
11 <sup>20</sup> –11 <sup>35</sup> O-9	<b>E. Gregoryanz</b> Simple Molecular Systems at High Pressures and Temperatures
11 <sup>30</sup> –12 <sup>00</sup>	<i>Кофе</i>

12 <sup>00</sup> –13 <sup>30</sup>	8 заседание; председатель В.Е. Антонов
12 <sup>00</sup> –12 <sup>15</sup> O-41	Е.А. Козлов, <b>В.И. Фельдман</b> , Л.В. Сазонова, Е.В. Сизова, И.В. Белятинская Высокобарические минеральные фазы, образующиеся при ударно-волновом нагружении граната
12 <sup>15</sup> –12 <sup>30</sup> O-43	<b>В.П. Филоненко</b> , И.П. Зибров, С.В. Гармаш, Д.В. Дробот, Е.Е. Никишина Новые гидраты тантала: кристаллизация и фазовые превращения при 5.0 ГПа
12 <sup>30</sup> –12 <sup>45</sup> O-34	<b>В.Ф. Скородумов</b> Статистическая термодинамика плавления полимеров при высоких давлениях
12 <sup>45</sup> –13 <sup>00</sup> O-28	<b>С.В. Овсянников</b> , В.В. Щенников Терромагнитные эффекты в прямозонных полупроводниках в области фазовых переходов под давлением
13 <sup>00</sup> –13 <sup>15</sup> O-48	<b>C. Sanloup</b> , G. Morard, G. Fiquet, E. Gregoryanz, M. Mezouar <i>In situ</i> Study of Liquid Fe and Liquid Fe-Alloys under High Pressures

13 <sup>30</sup> –14 <sup>00</sup>	<b>Закрытие</b>
14 <sup>00</sup> –14 <sup>30</sup>	<i>Обед</i>
14 <sup>30</sup>	<b>Выезд на экскурсию; разъезд</b>



# FIRST-PRINCIPLES SIMULATIONS OF ALLOY THERMODYNAMICS AT HIGH PRESSURE

I.A. Abrikosov

<sup>1</sup>*Department of Physics and Measurements Technology,  
Linköping University, Linköping, Sweden*

Studies of structural and phase stabilities of metallic systems are of major interest both from the theoretical and experimental points of view. It has been established that in transition metals and alloys the number of d-electrons per atom  $Z_d$  is responsible for the stability of a particular crystal structure. The variations of  $Z_d$  with the atomic number or under high pressure may therefore lead to solid-solid structural transitions. Note that the situation may be quite complicated in a general case. It has been shown earlier that even at ambient pressure simple rigid band arguments may fail to predict electronic and structural properties of random alloys, particularly with increasing separation between the positions of alloy components in the Periodic Table. High pressure adds one more degree of freedom into the problem. The main aim of the present work is to investigate theoretically the pressure induced phase transitions in several intermetallic systems.

We will review state-of-the-art techniques for first-principles theoretical simulations of the electronic structure and phase stabilities of intermetallic compounds and alloys. Particular attention will be paid to the so-called KKR method. It is based on the density functional theory, and the solution of the one-electron equations is obtained by means of the Green's function technique. The method allows for an efficient treatment of disorder effects. It also allows for a straightforward treatment of the effect of pressure, while the effect of temperature is included by means of the so-called multiscale modeling.

Applicability of first-principles theory for studies of intermetallic compounds is illustrated by calculations of the stability of the anomalous large-void CoSn structure. Voids in crystal structures of intermetallic compounds are most unusual and always give rise to speculations whether the observed phase is the ground state or not. Our calculations show that the void structure of CoSn is indeed the stable phase. With pressure we predict the following sequence of structural transformations: CoSn type  $\leftarrow$  FeSi type  $\leftarrow$  CsCl type. The structural properties of CoSn are understood in terms of competition between covalent and metallic bonding in the system.

We will also report on a detailed investigation of the combined effect of alloying and compression on the structural stability of random bcc and hcp alloys in the Mo-Re system. First-principles calculations of random bcc and hcp Mo-Re alloys were performed over the whole concentration interval. Our calculated equation of state agrees well with experimental data. We show that the bcc-hcp transition pressure decreases monotonously with increasing concentration of Re, but the rate of decrease is substantially less than that estimated in earlier model calculations. We explain the disagreement between earlier model predictions and experimental data. As a most recent example of application of our theory, we will discuss our calculations carried out for Fe-based alloys at Earth's core conditions.

## КОМПЛЕКСНОЕ СОПРОТИВЛЕНИЕ ОДНОСТЕННЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК ПРИ ДАВЛЕНИЯХ ДО 50 ГПА

А.Н. Бабушкин<sup>1</sup>, Я.Ю. Волкова<sup>1</sup>, О.В. Нарыгина<sup>1</sup>, С.Н. Шкерин<sup>2</sup>, Е.Д. Образцова<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Уральский Государственный Университет, Екатеринбург

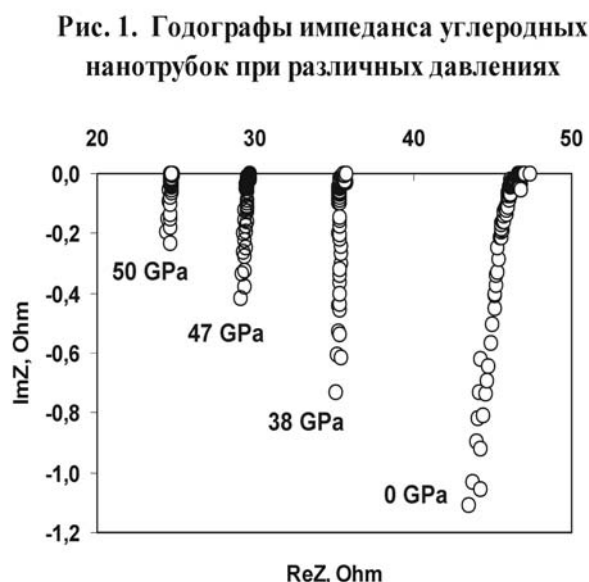
<sup>2</sup>Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, Екатеринбург

<sup>3</sup>Институт общей физики РАН, Москва

Проводимость одностенных углеродных нанотрубок, полученных методом HiPCO (чистота нанотрубок 99 %), была исследована при комнатной температуре в диапазоне давлений до 50 ГПа и частот от 50 Гц до 800 кГц.

Для генерации давлений до 50 ГПа использовали камеру высокого давления с наковальнями типа «закруглённый конус–плоскость» из синтетических поликристаллических алмазов «карбонадо» [1]. Исследования электрических характеристик нанотрубок проводили методом импедансной диэлектрической спектроскопии.

Были построены годографы импеданса [2] ячейки с образцом (рис. 1), рассчитаны диэлектрическая проницаемость, емкость и элемент постоянной фазы [3] одностенных углеродных нанотрубок и их зависимости от давления. Вид годографов импеданса характерен для систем, в эквивалентные схемы которых входит индуктивность. Можно предположить, что в нанотрубках существуют связанные заряды, вклад которых исчезает с увеличением давления.



[1] L.F. Vereshchagin, E.N. Yakovlev, G.N. Stepanov et.al. *JETF Lett.* **3** (1972) 16

[2] J.R. Macdonald. *Impedance Spectroscopy*, 1988 (N.Y., Wiley)

[3] Z.B. Stoinov, B.M. Grafov et al. *Electrochemical Impedance*, 1984 (M., Nauka)

## ВЫСОКОБАРНЫЕ ФАЗЫ В МЕТЕОРИТАХ

Д.Д. Бадюков<sup>1</sup>, Й. Райтала<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт геохимии и аналитической химии РАН, Москва

<sup>2</sup>Физический факультет Университета Оулу, Финляндия

Число метеоритов, содержащих высокобарные фазы (ВБФ), относительно невелико – оно составляет менее 1% от общего числа зарегистрированных метеоритов. Однако набор этих фаз достаточно разнообразен. Так, в метеоритах найдены лонсдейлит и алмаз, кремнезем представлен стишовитом и двумя фазами со структурами  $\alpha$ - $\text{PbO}_2$  и бадделеита ( $\text{ZrO}_2$ ),  $(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4$  – вадслеитом и рингвудитом (структуры  $\beta$ - и  $\gamma$ -шпинелей соответственно),  $(\text{Mg,Fe})\text{SiO}_3$  – мейджоритом, акимотоитом (структура ильменита) и фазой со структурой перовскита,  $\text{Ca}_9\text{MgNa}(\text{PO}_4)_7$  – фазой со структурой  $\gamma$ - $\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$ ,  $\text{Na}$  (или  $\text{K}$ )  $\text{AlSi}_3\text{O}_8$  – фазой с голландитовой структурой. В докладе приводятся данные по ВБФ в обычных хондритах и рассматриваются возможные механизмы их образования на родительских телах метеоритов. Очевидно, что практически все ВБФ возникли как результат воздействия ударных волн, генерированных при столкновении родительских тел метеоритов в космосе. Все ВБФ находятся в ударно-метаморфизованных метеоритах и, за исключением алмаза, ассоциируют с ударными прожилками – ветвящейся сетью жилок толщиной от 1 мкм до первых мм. Структурные данные указывают на то, что матрица этих прожилков испытала плавление. Для силикатов различаются две генерации ВБФ – а) слагающие эту матрицу и б) находящиеся в областях, прилегающих к прожилкам, а также в обломках в матрице прожилков. Для первой генерации ВБФ характерно присутствие в мейджорите  $\text{Ca}$ ,  $\text{Al}$  и  $\text{Na}$ , а в рингвудите – высокого  $\text{Fe}$ , тогда как состав второго типа ВБФ в общем идентичен составу исходных минералов – оливина и пироксена. В матрице также наблюдаются возможные следы реакции  $(\text{Mg,Fe})_2\text{SiO}_4 = (\text{Mg,Fe})\text{SiO}_3 + (\text{Mg,Fe})\text{O}$ . Судя по эффектам ударного метаморфизма в изученных хондритах, равновесное ударное давление находилось в диапазоне 25 – 30 ГПа. Нами предполагается, что ВБФ образовались в горячих зонах, возникавших на фронте УВ, причем температуры в них были достаточно высоки для плавления вещества – порядка 3000 К [1,2]. Вследствие быстрого теплообмена между стенками прожилка (~600К) и расплавом в условиях существования высокого давления произошла его кристаллизация. Одновременно или несколько позже высокие температуры инициировали в окрестностях прожилков твердофазовые переходы оливина и пироксена в рингвудит и мейджорит (ВБФ второй генерации). Высокие скорости остывания позволили сохранить ВБФ после разгрузки. Дальнейшие исследования могут быть полезны для разработки схем ударно-волнового синтеза ВБФ, а также для решения проблем минералогии мантии Земли.

[1] D.D. Badjukov, *Lunar and Planetary Science XVI*, 1985, LPI, Houston, Texas, p.21

[2] F. Langenhorst, J.-P. Poirier, *EPSL*, **184** (2000) 37

## НОВЫЙ МЕТОД НАГРУЖЕНИЯ: ДИНАМИКО-СТАТИЧЕСКОЕ СЖАТИЕ

С.С. Бацанов

*Центр высоких динамических давлений ВНИИФТРИ, Менделеево*

Метод ударного сжатия обладает рядом достоинств по сравнению с техникой статического нагружения, а именно более простой аппаратурой, быстротой проведения эксперимента, большими возможностями в варьировании термодинамических параметров и отсутствием ограничений на габариты исследуемых образцов. Однако, эти преимущества компенсируются недостатками метода, а именно жёсткой связью давлений и температур в обжимаемом образце, определяемой уравнением состояния, и чрезвычайной кратковременностью нагружения. По этим причинам ни в одном динамическом эксперименте не удалось сохранить фазы высокого давления (ФВД) в виде основного продукта в монолитном, а тем более – в монокристалльном состоянии.

Классическим примером сказанного является проблема получения плотных форм углерода и нитрида бора: хотя в ударной волне наблюдается полное превращение графита в алмаз, в сохранённых продуктах ФВД составляет лишь проценты из-за её отжига остаточным теплом, развивающимся в обжимаемом материале. Борьба с отжигом путём добавления в исходную фазу технологических добавок («холодильников») требует последующего их удаления (химическими методами), а самый мощный метод охлаждения – детонация – с расширением образующихся продуктов, также как и в предыдущем способе приводит к образованию тонкодисперсного материала, который для использования, например в качестве инструмента, надо спекать под статическим давлением. Таким образом, преимущества динамического метода в материаловедении высокого давления сходят на нет, кроме тех случаев, когда полученная порошкообразная ФВД используется в качестве абразива.

В Центре высоких динамических давлений разработана новая схема нагружения твёрдых тел, которая объединяет оба метода сжатия и потому именуется «динамико-статическое сжатие, ДСС». В этом методе исследуемое вещество, например порошок гексагонального нитрида бора, помещается в капсулу из фольги (стандартные размеры таблетки: 10 мм диаметр и 6 мм высота), которая запрессовывается в рабочее тело, например в КВг, и этот образец размещается в прочной цилиндрической ампуле сохранения. Данная ампула окружается цилиндрическим зарядом ВВ, при подрыве которого внутри развивается высокое давление, которое последовательно превращает в ФВД и рабочее тело (при  $P \geq 2$  ГПа) и *h*-BN (при  $P \geq 15$  ГПа), и ампула, соответственно, сжимается. После достижения пика давления начинается стадия разгрузки, на которой КВг должен обратимо вернуться в исходное состояние с увеличением объёма на ~15 %, но прочная ампула (ещё более упрочнённая в процессе взрыва) не позволяет рабочему телу расширяться и создаёт внутреннее остаточное давление в 2 ГПа.

В результате образовавшийся *w*-BN остывает в условиях высокого статического давления, сохраняется полностью и формируется в прочный монолитный образец (с давлением раздавливания  $110 \text{ кг/мм}^2$  такого вида, который задаётся формой капсулы).

Исследование термодинамических параметров внутри ДСС-ампулы говорит о формировании маховской конфигурации ударных волн, которая вызывает закономерное изменение физических свойств (в частности, твёрдости) образцов *w*-BN. Максимальное значение твёрдости (80 ГПа) зафиксировано в аксиальной части таблетки.

В настоящее время разрабатывается технология предварительного разогрева образца внутри ДСС-ампулы без потери её прочности.

## ТЕПЛОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ И ПОЛИМОРФИЗМ МЕТАЛЛОВ

М.С. Блантер<sup>1</sup>, В.П. Глазков<sup>2</sup>, В.А. Соменков<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Московская государственная академия приборостроения и информатики, Москва*

<sup>2</sup>*РНЦ «Курчатовский институт», Москва*

На основе измерений температурной зависимости фактора Дебая–Валлера и упругих констант показано, что в различных полиморфных модификациях урана и плутония наблюдается различная температурная зависимость среднеквадратичных тепловых атомных смещений и что в каждой температурной области оказывается устойчивой модификация с наименьшим относительным уровнем тепловых атомных смещений. В этих металлах скорость нарастания тепловых смещений с температурой возрастает и сильно отклоняется вверх от почти линейной дебаевской зависимости, что свидетельствует об ангармоническом поведении. Эта температурная зависимость ослабляется при переходе от низкотемпературных к высокотемпературным полиморфным модификациям, т.е. ангармонизм ослабляется при этих превращениях.

При сильной температурной зависимости относительных тепловых атомных смещений низкотемпературная модификация оказывается неустойчивой по отношению к плавлению при относительно низких температурах. В более высокотемпературной модификации уровень тепловых смещений выше, но медленнее нарастает с температурой и поэтому, начиная с некоторой температуры, оказывается ниже, чем в низкотемпературной фазе при тех же условиях. Вместо плавления низкотемпературной фазы произойдет ее переход в высокотемпературную фазу с наименьшим в данном температурном интервале уровнем тепловых смещений и тем самым расширяется температурная область существования кристаллического состояния. Таким образом, явление полиморфизма, в определенной степени, обусловлено стремлением сохранить устойчивость кристаллического состояния по отношению к плавлению.

Аналогичный подход позволяет объяснить также стабилизацию в этих металлах высокотемпературных фаз легированием атомами легких элементов, вызывающих появление в фоновом спектре дополнительной линии выше дебаевской частоты, что приводит к снижению среднеквадратичных тепловых атомных смещений.

Предложенный подход может быть распространен на случай барического полиморфизма металлов и сплавов и делает актуальным при изучении полиморфизма определение тепловых смещений в широком диапазоне температур и давлений.

Работа поддержана программой «Нейтронные исследования конденсированных сред» и РФФИ по гранту 04-02-16881-а.

**PHYSICAL CHARACTERIZATION OF CRYSTALLINE  
3D-POLYMERIC C<sub>60</sub> AND C<sub>70</sub> FULLERENES OBTAINED BY  
HIGH-PRESSURE-HIGH-TEMPERATURE TREATMENT**

S.G. Buga<sup>1</sup>, V.D. Blank<sup>1</sup>, G.A. Dubitskiy<sup>1</sup>, K.V. Gogolinskii<sup>1</sup>,  
V.M. Prokhorov<sup>1</sup>, N.R. Serebryanaya<sup>1</sup>, B. Sundqvist<sup>2</sup>, Å. Fransson<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Technological Institute for Superhard and Novel Carbon Materials, Troitsk, Russia*

<sup>2</sup> *Umea University, Umea, Sweden*

Polymeric fullerenes are new carbon solids obtained from either pure or doped fullerenes by UV illumination, charge transfer or high-pressure high-temperature treatment (HPHT) [1-5]. We created 3D-polymeric (bulk polymer) C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> solids by static HPHT at  $P = 9.5\text{--}15$  GPa and investigated their structure and physical properties. Of particular interest are crystalline 3D-polymeric fullerenes because their structures represent absolutely new carbon solids of zeolite type with combined  $sp^2$ - $sp^3$  interatomic bonding and varied lengths of bonds [5]. Physical properties of these new carbon solids strongly depend on real structures obtained at certain pressure-temperature conditions from either solid C<sub>60</sub> or C<sub>70</sub>. Crystal 3D-polymeric fullerites realise in a narrow temperature range of synthesis (670-820 K) at pressures in the range of 10–15 GPa. At higher treatment temperatures disordered structures have been obtained.

We synthesized and investigated crystalline 3D-polymers of C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> with the densities in the range of 2.2–2.5 g cm<sup>-3</sup>. Their structures have been investigated by X-ray powder diffraction, Raman scattering, HRTEM, and the  $sp^2/sp^3$  sites ratio analysed by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS).

The thermal stability of obtained new materials has been studied by DSC method in the range of 240–640 K. The densest crystal polymers were stable up to the temperature of about 500–550 K whereas the low-density structures started to dissociate at about 380-400 K.

Electrical transport in 3D-polymeric fullerenes attracts great attention because they contain both  $sp^2$  and  $sp^3$  interatomic bonds. The resistivity versus temperature function was measured in the range of 30–300 K. The evaluated band gap of such intrinsic semiconductor is 0.26 eV. The room-temperature resistivity,  $\rho_{300\text{K}}$ , was  $1.5 \cdot 10^3 \Omega \text{ cm}$ . The value of  $\rho_{300\text{K}}$  for C<sub>70</sub> polymer with the density of 2.2 g/cm<sup>3</sup> was less – about 100  $\Omega \text{ cm}$ , and the activation energy of charge carriers,  $E_a$ , at room temperature was just about 0.08 eV. The activation law of conductivity was not typical Boltzmann-type, but followed very precisely to  $T^{3/2}$  factor. We observed a similar behaviour and a low  $E_a$  value also on dense (2.8 g cm<sup>-1</sup>) disordered C<sub>60</sub> polymer, thus we suspect that networks of  $sp^2$ -bonded carbon atoms may induce such a relatively shallow level in the band-gap formed by  $sp^3$ -matrix.

- [1] H. Kuzmany, J. Winter, B. Burger, *Synth. Met.* 85 (1997) 1173
- [2] V.D. Blank, S.G. Buga, G.A., Dubitskiy et al., *Phys. Lett. A* 220 (1996) 149
- [3] V.D. Blank, S.G. Buga, N.R. Serebryanaya et al., *Appl. Phys. A* 64 (1997) 247
- [4] B. Sundqvist, *Adv. Phys.* 48 (1999) 1
- [5] L.A. Chernozatonskii, N.R. Serebryanaya, B.N. Mavrin, *Chem. Phys. Lett.* 316 (2000) 199

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ ВОДЫ

Ю.Г. Бушуев<sup>1,2</sup>, С.В. Давлетбаева<sup>2</sup>, Т.А. Дубинкина<sup>3</sup>

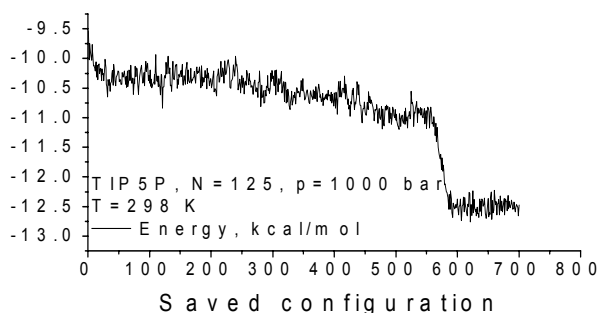
<sup>1</sup>ГОУВПО «Ивановский государственный химико-технологический университет», Иваново

<sup>2</sup>Институт химии растворов РАН, Иваново

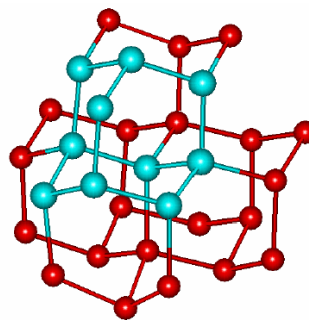
<sup>3</sup>ГОУВПО «Ивановская государственная архитектурно-строительная академия», Иваново

Несмотря на значительные успехи в исследовании жидких систем, относительно мало работ посвящено изучению процессов кристаллизации методами компьютерного моделирования [1]. Решение подобных задач требует огромных компьютерных ресурсов. Известны две работы [2,3], в которых фазовый переход вода–лед впервые описан в больших элементарных ячейках моделирования ( $N \sim 500$ ).

Нами разработана методика моделирования процессов кристаллизации воды, позволяющая получать структуры льдов за короткие времена счета. Мы провели



**Рис.1.** Фазовый переход вода-лед Ic.



**Рис.2.** Структура воды после фазового перехода.

моделирование воды с потенциалами TIP5P и 6-points методом Монте Карло (МК) в  $NPT$  ансамбле при  $N=125$ ,  $T=298$  К и давлении до 1 ГПа. Получено несколько кристаллических фаз воды, в частности, лед Ic. Наш метод открывает практическую возможность детального исследования процессов кристаллизации на молекулярном уровне. Второй способ моделирования структур льдов основан на использовании информации о геометрических параметрах кристаллических ячеек льдов. Мы модифицировали программу метода МК. Вычисления провели в  $NVT$  ансамбле. Примитивная кристаллическая ячейка окружалась 26 идентичными ячейками. Использовали периодические граничные условия, но, в отличие от стандартной методики, радиус ограничения потенциала взаимодействия значительно превышал размеры элементарной ячейки. Этот способ дал структуры ряда реально существующих льдов для моделей воды с различными потенциалами взаимодействий (TIP5P, SPC/E, Маленкова–Полтева и др.). Во многих случаях время моделирования процесса кристаллизации не превышало 30 мин. при работе на персональном компьютере.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 04-03-32363а).

- [1] P. Verwer, F. Leusen, *Rew. Comput. Chem.* **12** (1998) 327
- [2] M. Matsumoto, S. Saito, I. Ohmine, *Nature* **416** (2002) 409
- [3] M. Yamada, S. Mossa, H.E. Stanley, F. Sciortino, *Phys. Rev. Lett.* **88** (2002) 195701-1

## ВОЗДЕЙСТВИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ ДАВЛЕНИЙ НА НАНОУГЛЕРОДНЫЕ ОБЪЕКТЫ

Ю.Ф. Бирюлин, П.Н. Брунков, А.Я. Вуль, А.Т. Дидейкин, Б.Г. Жуков, С.В. Кидалов, М.Н. Корытов, А.В. Нащекин, С.И. Розов, З.Г. Царёва, Ф.М. Шахов, М.А. Яговкина

*Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург*

В работе рассматривается возможность использования динамического давления для решения двух задач:

- осуществить структурные фазовые переходы в фуллерене  $C_{60}$  при давлениях существенно больших, чем достигается в статическом режиме,
- осуществить дезагрегацию кластеров наноалмазов детонационного синтеза.

Эксперименты проводились с использованием компактного ускорителя – "быстрого" рельсотрона, разработанного в ФТИ, позволяющего разгонять пластиковые ударники калибром 1–3 мм до скоростей 5.5 км/с в обычном лабораторном помещении в воздухе при атмосферном давлении, что соответствует, по оценкам, динамическим давлениям до 50 ГПа [1]. В работе приводятся данные по исследованию кристаллической структуры фуллерена  $C_{60}$  после воздействия динамического давления. Степень нагрева при динамическом воздействии определяется степенью неупругости (пористостью) среды и, возможно, была несущественной [2].

В эксперименте использовался фуллерен  $C_{60}$  чистотой 99.5%. Предварительно  $C_{60}$  прессовали давлением 150–200 МПа на ручном прессе. Предполагается, что при прессовании фазового перехода из ГЦК в ПК фазу не происходит, что подтвердилось рентгеновскими исследованиями. Плотность фуллерена после прессования оказалась  $\sim 1.64$  г/см<sup>3</sup>. Образец в виде шайбы диаметром около 8 мм помещался в металлическую камеру под металлическую пластину-мембрану. После соударения с ударником в пластине, а затем и в образце распространяется ударная волна. Малый размер ударника определяет время соударения (взаимодействия) с мишенью, которое составляет 0.3–0.5 мкс, т.е. в камере распространяется короткий импульс давления, при этом ударная волна близка к сферической, и давление концентрически убывает от центра удара.

Структура модифицированных при высоком динамическом давлении фуллеренов  $C_{60}$  исследована методом рентгеновской дифракции; изучены спектры фотолюминесценции при комнатной и азотной температурах.

Избыточная поверхностная энергия приводит к агрегации малых кластеров. Такая агрегация ясно проявляется в порошках алмаза детонационного синтеза, получаемого при детонации взрывчатых веществ. Область когерентного рассеяния в таких алмазах составляет около 5 нм, однако в суспензиях не удается получить размеры агрегатов менее сотен нанометров даже после обработки ультразвуком. В то же время получение суспензий из агрегатов, состоящих из отдельных кластеров, представляется весьма заманчивым. В работе методом туннельно-силовой микроскопии экспериментально показано, что динамическое воздействие на суспензию приводит к получению агрегатов, состоящих из 4–5 кластеров с общим размером около 10 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Минобразования и науки «Управляемый синтез фуллеренов и других атомных кластеров» и программы Президиума РАН «Низкоразмерные квантовые структуры».

[1] Е.М. Drobyshovski *et. al.* In *Progr. in Plasma Processing of Materials*, NY, Wallingford, 1999, 121-126.; *IEEE Trans. Magn.*, **31** (1995) 299; 4th Eur. Symp. *Electromagnetic Launch Technology*, 1993, Celle, Germany, Paper P206, p.8; *AIAA-Paper* 93-3159 (1993) pp.1-7.

[2] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Гидродинамика*. Курс теор. физики, т. 6, с. 469 (1988).



## SIMPLE MOLUCULAR SYSTEMS AT HIGH PRESSURES AND TEMPERATURES

E. Gregoryanz

*Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington,  
5251 Broad Branch Road NW, Washington D.C. 20015 USA*

The evolution of molecular solids under pressure constitutes an important problem in condensed matter physics. Under compression, delocalization of electronic shells and eventual molecular dissociation is expected, leading to the formation of a framework or closed packed structures. However, this process may not necessarily be simple and direct, because of large barriers of transformation between states with different types of bonding and molecular structures with various types of orientational order, including possible associated and charge transfer intermediate states.

We report the discovery of a new class of molecular phases of solid nitrogen at high pressures and temperatures by Raman scattering, infrared and optical absorption, and powder synchrotron X-ray diffraction. The most remarkable is a new phase,  $\theta$ , that is characterized by strong intermolecular interactions and infrared vibron absorption and can be reached within the wide pressure range at temperatures above 550 K. The second phase,  $\iota$ , is diatomic with orientationally equivalent molecules. Both phases can be quenched to room temperature and are observed over a wide  $P$ - $T$  range from 20 to 100 GPa and 30 to 1000 K. The results suggest a major revision of the phase relations of nitrogen at high pressures and temperatures.

We also have conducted high  $P$ - $T$  Raman measurements of solid and fluid hydrogen to above 1100 K and to 155 GPa, conditions previously inaccessible by static compression experiments. These measurements provide new insight into the behavior of the material under extreme conditions. The data give a direct measure of the melting curve that extends previous optical investigations by up to a factor of four in pressure. The magnitude of the vibron temperature derivative  $dv/dT_P$  increases by a factor of  $\approx 30$  over the measured pressure range, indicating an increase in intrinsic anharmonicity and weakening of the molecular bond. Moreover, there is an unexpected increase in intensity of the Raman vibron that arises from the combined  $P$ - $T$  effects on the electronic properties.

# О ПРИРОДЕ “ТЯЖЕЛЫХ” ЭЛЕКТРОНОВ В БЕСЩЕЛЕВЫХ И УЗКОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ CdHgTe *p*-ТИПА ПО ИССЛЕДОВАНИЯМ ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА В КРИТИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

М.И. Даунов, И.К. Камилов, С.Ф. Габибов

*Институт физики Дагестанского научного центра РАН, Махачкала*

Происхождение тяжелых электронов, участвующих в процессах переноса в кристаллах CdHgTe *p*-типа, трактуется неоднозначно [1]. Предполагают, что они либо связаны с поверхностными состояниями, либо являются объемными, и эти тяжелые носители, вероятно, принадлежат акцепторной зоне. В [2,3] показано, что аномалии кинетических свойств, аналогичные соответствующим особенностям в CdHgTe, определялись локализацией носителей заряда в ямах рельефа дна зоны проводимости, формируемого флуктуациями концентрации заряженных центров. Было отмечено также, что в процессах переноса в переходной области, когда уровни протекания и Ферми  $\varepsilon_F \approx \varepsilon_p$ , одновременно принимают участие делокализованные и локализованные электроны зоны проводимости. Предлагаемая модель естественно объясняет аномалии температурных, магнитополевых и барических зависимостей коэффициентов Холла  $R(T, H, P)$  и электропроводности  $\sigma_0(T, P)$  в кристаллах *p*-HgTe. Ниже приведены результаты количественного анализа для бесщелевого полупроводника *p*-HgTe с концентрацией акцепторных центров  $N_A \approx 10^{16} \text{ см}^{-3}$  ниже критической и концентрацией доноров  $N_D \approx 2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ . Используются экспериментальные данные из работы [4].

1. Известно [1], что в *p*-HgTe всегда имеются мелкие донорные центры с нулевой энергией активации, образующие с зоной проводимости единую зону распространяющихся состояний. Край зоны – уровень протекания – располагается ниже потолка валентной зоны, и формируется состояние типа сильно легированного полностью компенсированного полупроводника.

2. При  $T=4.2 \text{ К}$  с увеличением всестороннего давления уровень Ферми, вследствие убывания плотности состояния зоны проводимости, приближается к акцепторному уровню, и электроны локализуются на примесях. Концентрация ионизированных центров  $N_A^-$  растет, подвижности  $\mu_1$  и  $\mu_2$  и концентрации  $n_1$  и  $n_2$ , соответственно, легких и тяжелых электронов убывают, параметры  $c=n_2/n_1$  и  $b=\mu_1/\mu_2$ , возрастают, причем  $c < b$  при  $P < 0.3 \text{ ГПа}$  и  $c > b$  при  $P > 0.3 \text{ ГПа}$ .

3. С убыванием температуры от  $4.2 \text{ К}$  к нулевой параметры  $N_A^- \rightarrow 0$ ,  $\mu_2 \rightarrow 0$ ,  $b \rightarrow \infty$ , коэффициент Холла растет по абсолютной величине,  $|R_0| \rightarrow (n_1 e)^{-1}$  и при  $P > 0.3 \text{ ГПа}$ , когда  $c > b$  при  $T=4.2 \text{ К}$ , проходит через экстремум. При  $T=0 \text{ К}$   $\varepsilon_F > \varepsilon_p$ .

Отметим, что прогресс в интерпретации экспериментальных данных, обусловлен применением эффективного возмущающего воздействия всестороннего давления.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 02–02–17888)

[1] I.M. Tsidilkovski, G.I. Narus, N.G. Shelushinina. *Adv. Phys.* **34** (1985) 43

[2] M.I. Daunov, I.K. Kamilov, A.B. Magamedov. *JETP*. **84**(2) (1997) 309

[3] М.И. Даунов, И.К. Камилов, В.А. Елизаров, А.Б. Магомедов, В.И. Данилов. *Докл. РАН*. **357** (1997) 612

[4] J. Stankiewicz, W. Giriat. *Phys. Rev. B*. **13** (1976) 665

## NOVEL CHAIN STRUCTURES IN GROUP VI ELEMENTS

O. Degtyareva, E. Gregoryanz, H-K. Mao, R.J. Hemley

*Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington,  
5251 Broad Branch Road NW, Washington D.C. 20015 USA.*

Sulfur is a well studied element, having one of the most complicated phase diagram among elements, with 12 solid and 5 liquid phases up to pressures of 4 GPa [1]. A wealth of interesting phenomena has been observed *in situ* under pressure, such as metallization at 95 GPa [2] and observation of superconductivity up to 230 GPa with high temperature of superconducting transition [3]. However, the diffraction studies on sulfur reported in literature so far are of poor quality; hence, there is little reliable information on the crystal structures of its high pressure phases [4,5]. The most recent *in situ* study on the low-pressure phase diagram of sulfur [6] provided the first high-quality diffraction data on high-pressure sulfur and reported breaking down of the ambient-pressure molecule rings and formation of a chain structure. However, this study [6] was restricted to 5 GPa, and the high-pressure behavior of the chain structure remains unknown.

Present study shows that the existing knowledge about the high-pressure structures of sulfur is, in fact, archaic: we present the first high-quality diffraction data for the high-pressure forms of sulfur stable between ambient pressure and approximately 80 GPa. Using new *in situ* diffraction techniques we show that the phase diagram of sulfur is very different from that previously proposed, with three stable phases between ambient pressure and 75 GPa and temperatures from 300 K and 1100 K. The structures of two high-pressure phases, S-II, previously observed in Ref. [6], and S-III, reported here for the first time, are solved in the present work.

Most significantly, we find that both phases have novel chain structures that have not been previously described for any element. The newly determined non-metallic chain structures of sulfur provide information that is critical for understanding its higher pressure behavior. Further, we show that the next member of chalcogen family, selenium, has a high-pressure phase that is identical to S-III. Thus, selenium is shown to have a chain structure in its non-metallic state, showing that this chain structure is not just a peculiarity of sulfur.

- [1] D.A. Young, *Phase Diagrams of the Elements*, Univ. of California Press, (Oxford, England, 1991)
- [2] H. Luo, S. Desgreniers, Y. Vohra and A. Ruoff, *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991) 2998
- [3] V.V. Struzhkin, R.J. Hemley, H.K. Mao and Yu.A. Timofeev, *Nature* **390** (1997) 382  
E. Gregoryanz, V.V. Struzhkin, R.J. Hemley, M.I. Erements, H-K. Mao, and Y.A. Timofeev, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 64504
- [4] Y. Akahama, M. Kobayashi and H. Kawamura, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 6862
- [5] H. Luo and A.L. Ruoff, *Phys. Rev. B* **48** (1993) 569  
H. Luo, R.G. Greene and A.L. Ruoff, *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993) 2943
- [6] M. Mezouar, *Program of the School on Crystallography at High Pressure*, Erice, 2003.

# ДЕФОРМАЦИЯ БЕЙНА ГЦК-ОЦК В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ In и Sn: ОПРЕДЕЛЯЮЩАЯ РОЛЬ ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

В.Ф. Дегтярева

*Институт физики твердого РАН, Черноголовка*

Две основные металлические структуры *гцк* и *оцк* можно рассматривать на основе общей тетрагональной структуры *оцт* с  $c/a$  равным  $\sqrt{2}$  и 1, соответственно. Превращение *гцк* - *оцк* можно осуществить сжатием решетки по оси  $c$  - путем деформации Бейна (Bain path). Интерес к превращению *гцк* - *оцк* возник в связи с превращениями в системе железо - углерод при термической обработке. Подобные переходы вызывает воздействие давления, например, *гцк* - *оцк* для элементов Ca и Sr, или *оцк* - *гцк* для щелочных металлов от Li до Cs. Превращение Бейна наблюдается в металлических пленках при осаждении на подложку, вследствие напряжений из-за размерного несоответствия решеток осажденного металла и подложки. Во всех рассмотренных выше случаях превращение Бейна происходит под влиянием внешних факторов – температуры, давления или напряжения.

Особый случай структурной трансформации *гцк* - *оцк* под воздействием внутреннего фактора - числа валентных электронов - имеет место в сплавах *sp* металлов III-IV групп (на основе In и Sn). Нами рассмотрены тетрагональные фазы в бинарных системах (In-Sn, In-Pb, In-Bi и других), известные при нормальном давлении [1] и полученные в наших исследованиях при высоком давлении [2-7]. Установлена корреляция тетрагонального искажения ( $c/a$ ) для фаз и среднего числа валентных электронов на атом металла в сплаве ( $z$ ). Зависимость  $c/a$  от  $z$  имеет немонотонный характер, для объяснения которого следует учитывать два основных вклада в энергию структуры: электростатический и валентно-электронный. Для модели приближения свободных электронов в случае *sp*-металлов, определяющее значение при тетрагональной деформации структуры вносит энергетический вклад взаимодействия сферы Ферми и зоны Бриллюэна (СФ-ЗБ). Вклад СФ-ЗБ усиливается при повышении давления, что проявляется в структурных изменениях, экспериментально наблюдаемых для сплавов под давлением:

- переход *гцк* - *гцт* в сплавах In-Pb с 40 и 60 ат.% Pb [5];
- распад соединения  $\text{In}_5\text{Bi}_3$  на две тетрагональные фазы с разными  $c/a$  [6];
- изменение скачком от  $c/a > 1$  к  $c/a < 1$  в сплаве In-10 ат.% Pb [7];

Эта модель может быть полезна для анализа устойчивости тетрагональных структур и понимания валентного состояния металлов с переменной валентностью, например, лантанидов и актинидов, и соединений этих металлов.

- [1] W.B. Pearson. *A Handbook of Lattice Spacings and Structures of Metals and Alloys*, 1964 (N.-Y., Pergamon Press)
- [2] V.F. Degtyareva, M. Winzenick et al. *Phys. Rev. B* **57** (1998) 4975
- [3] V.F. Degtyareva, O. Degtyareva et al. *Phys. Rev. B* **59** (1999) 6058
- [4] V.F. Degtyareva, O. Degtyareva et al. *Phys. Rev. B* **61** (2000) 5823
- [5] O. Degtyareva, V.F. Degtyareva et al. *J. Phys.: Condens. Matter* **13** (2001) 7295
- [6] O. Degtyareva, V.F. Degtyareva et al. *J. Phys.: Condens. Matter* **14** (2002) 407
- [7] V.F. Degtyareva, I. K. Bdikin et al. *J. Phys.: Condens. Matter* **15** (2003) 1635

## РУБИНОВЫЙ СТАНДАРТ ДАВЛЕНИЯ И ЕГО АЛЬТЕРНАТИВЫ

П.И. Дорогокупец<sup>1</sup>, А.Р. Оганов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт земной коры СО РАН, Иркутск

<sup>2</sup>ETH, Zurich, Switzerland

Рассмотрены уравнения состояния Cu, Ag, MgO, NaCl, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и алмаза на основе модифицированного формализма [1] с учетом современных рентгеновских, ультразвуковых, термохимических, ударных и теоретических данных. Тепловая часть свободной энергии Гельмгольца аппроксимирована функциями Эйнштейна и Бозе–Эйнштейна [1,2], холодное давление рассчитано по уравнению В.Б. Хольцапфеля в форме AP<sup>2</sup> [3]. Вклад внутренней ангармоничности записан в виде [4], что дает правильные пределы при низких и высоких температурах. Электронная составляющая учтена по модели [5], объемная зависимость параметра Грюнайзена представлена моделью [6]. На этой основе построены уравнения состояния Cu, Ag, MgO, NaCl, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и алмаза. Рассчитанные термодинамические функции ( $C_P$ ,  $K_S$ ,  $P$ ,  $V$ ) в пределах 0.5–2 % согласуются с экспериментом в области от 10–15 К до температуры плавления и до сжатия  $x=V/V_0=0.5$ .

Проведено сопоставление полученных комнатных изотерм Cu и Ag с данными [7] и показано, что рубиновый стандарт [8] недооценивает давление до 2 ГПа при 70 ГПа [9], что согласуется с оценкой [10]. Пересмотрено уравнение состояния NaCl [11] с учетом нового уравнения состояния MgO, в котором критическими являются ударные данные [12] и [13]. Если их вес одинаков, тогда объемная зависимость параметра близка к теоретической [14] и полученные изотермы MgO до сжатия  $x=0.5$  можно использовать для калибровки давления. Из уравнения состояния алмаза следует, что с теоретическими [15] и квазигидростатическими данными [16] согласуются рубиновые шкалы [9] и [10].

Работа поддержана РФФИ (02-05-64062).

- [1] P.I. Dorogokupets, *Geochem. Inter.* **40** (2002) 132
- [2] А.М. Кутын и др., *ЖФХ* **72** (1998) 1735
- [3] W.B. Holzapfel, *Z. Kristallogr.* **216** (2001) 473
- [4] A.R. Oganov and P.I. Dorogokupets, *J. Phys.: Condens. Matter* **36** (2004) 1351
- [5] В.Н. Жарков, В.А. Калинин, *Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах*, 1968 (М., Наука)
- [6] Л.В. Альтшулер и др., *ПМТФ* **161** (1987) 134
- [7] W.J. Carter et al., *NBS Spec. Publ.* **326** (1971) 147
- [8] Н.К. Мао et al., *J. Geophys. Res.* **91B** (1986) 4673
- [9] П.И. Дорогокупец и А.Р. Оганов, *ДАН* **391** (2003) 515
- [10] W.B. Holzapfel, *J. Appl. Phys.* **93** (2003) 1813
- [11] П.И. Дорогокупец, *Вестн. Отд. Наук о Земле РАН* **1(21)** (2003) [www.scgis.ru](http://www.scgis.ru)
- [12] Л.В. Альтшулер и др., *Изв. АН СССР. Физ. Земли* (1965) 657
- [13] T.S. Duffy and T.J. Ahrens, *Geophys. Res. Lett.* **20** (1993) 1103
- [14] A.R. Oganov & P.I. Dorogokupets, *Phys. Rev. B* **67** (2003) 224110
- [15] K. Kunc et al., *Phys. Rev. B* **68** (2003) 094107
- [16] F. Occelli et al., *Nat. Mater.* **2** (2003) 151

## CHEMICAL REACTIONS AT EXTREME CONDITIONS: APPROACHING EARTH MAJOR INTERFACE

L.S. Dubrovinsky, N.A. Dubrovinskaia

*Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, 95440 Bayreuth, Germany*

The boundary between the Earth's mantle and core (so-called D'' layer) draws attention because of the large contrast in properties across this region. The seismologically observed changes in density and sound wave velocities, for example, are significantly (2-3 times) greater than across the air-rock (or air-seawater) interface at the Earth's surface. Moreover, the difference in materials across the boundary with predominantly crystalline rock above and liquid iron alloy below is among the most profound in the Earth. In this sense, the core-mantle boundary (CMB) can be considered the primary "surface" of the planet, and it is simply because of remoteness that it has attracted less study than the top of the Earth's crust. On the other hand, processes at CMB directly or indirectly affect us. There is a number of geophysical, geochemical, and seismological arguments which link processes at D'' layer and at the surface of the Earth. For example, super-plumes originating from the core-mantle boundary manifest themselves as hot-spot volcanoes on Hawaii.

Experimental studies of processes at CMB is a challenging task due to extremely high pressures (exceeding 1400000 atm.) and temperatures (of the order of 3000 K). Only internally electrically- or laser-heating in diamond anvil cells can generate appropriate conditions. However, samples are exceptionally small (typically they have 35-50  $\mu\text{m}$  diameter and less than 10  $\mu\text{m}$  thickness, masses about  $10^{-7}$  g) and only combinations of most powerful techniques (synchrotron X-ray diffraction, luminescence and absorption methods, analytical TEM, microprobe, Mössbauer spectroscopy) can cast light on the processes at CMB. The chemistry at such tremendous Earth's depth is quite unusual. For example, iron, which at ambient conditions is more electronegative than aluminum, significantly changes its chemical nature at pressures above 60 GPa and temperatures over 2200 K and becomes able to reduce aluminum from its oxide (providing possible source of aluminium for the Earth's core). Although iron and silica easily reacting at low pressure and high temperatures, at high pressures of 85-140 GPa, iron and  $\text{SiO}_2$  do not react, and iron-silicon alloys dissociate into almost pure iron and the CsCl-structured (*B2*) FeSi compound. Experimental observations suggest that during formation and differentiation of proto-Earth, iron alloy, segregating in a deep magma ocean and thus containing several wt% Si, would subsequently decompose into a mixture of Si-poor iron phase and silicon-rich *B2* phase in the core. The metallic silicon-rich *B2* phase, produced by this reaction, or produced at the CMB due to reaction between iron and silicate, is denser than the material of lower mantle and lighter than liquid iron in the Earth's outer core and should accumulate at the CMB. The presence of *B2* FeSi at the base of Earth's lower mantle could explain the anomalously high electrical conductivity of this region. Further studies of possible chemical reactions between iron and its alloys (which represent Earth's core) and complex Mg-Fe-Si-Al-oxides (which model composition of Earth's lower mantle) could uncover many so far enigmatic properties of most drastic Earth's interface.

## КИНЕТИКА ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ. ТЕНЗОМЕТРИЧЕСКИЙ МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ.

Ф.С. Елькин, О.Б. Циок, Л.Г. Хвостанцев

*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк*

Исследование механизмов и кинетики полиморфных превращений в веществах при сильном сжатии является одной из фундаментальных задач физики высоких давлений. Теоретические основы кинетики фазовых превращений в твердом теле были заложены более полувека назад. Однако из-за отсутствия до недавнего времени прецизионных экспериментальных данных, до сих пор нет ясного представления о кинетике фазовых переходов под давлением. В последнее десятилетие интенсивно развивались рентгеновские методы, использующие яркое синхротронное излучение. Опубликован ряд экспериментальных работ по исследованию кинетики фазовых переходов под давлением энергодисперсионным методом. Однако, несмотря на высокую чувствительность этого метода и возможность проведения измерений *in situ*, порог обнаружения новой фазы составляет около 1 %, что является недостаточным для исследования начальных стадий зарождения и роста зародышей.

В докладе рассмотрены перспективы применения тензометрического метода для исследования кинетики фазовых превращений при высоком давлении и представлены первые результаты на примере перехода в монокристалле флюорита  $\text{CaF}_2$ .

Преимуществом тензометрического метода [1] перед рентгеновским является его высокая чувствительность при сравнимой абсолютной точности. При использовании тензометрического метода легко достигается порог обнаружения новой фазы на уровне 0.03 %. Метод работает в широком диапазоне температур от комнатной до 450°C [2]. Проведение исследований на монокристаллических образцах в условиях идеальной гидростатики позволяет избежать ошибок, возникающих при использовании твердой передающей среды (неоднородность давления, действующего на образец, и, как следствие, сдвиговые напряжения и неоднородные деформации).

На примере фазового перехода в  $\text{CaF}_2$  показано, что переход со скачком объема при высоком давлении происходит в несколько этапов с различными скоростями и закономерностями. Обсуждаются причины «неклассического» поведения кинетических кривых.

[1] O.B. Tsiok, V.V. Bredikhin, V.A. Sidorov, and L.G. Khvostantsev, *High Pressure Research*, **10** (1992) 523

[2] Ф. С. Елькин, О. Б. Циок, Л. Г. Хвостанцев, *ПТЭ* № 1 (2003) 112

## POLYMERIC NITROGEN

M.I. Eremets<sup>1</sup>, A.G. Gavriliuk<sup>1,2</sup>, I.A. Trojan<sup>1,2</sup>, M.Yu. Popov<sup>1</sup>, D.A. Dzivenko<sup>1</sup>, R. Boehler<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Max Planck Institute für Chemie, Postfach 3060, 55020 Mainz, Germany

<sup>2</sup>High Pressure Institute of Russian Academy of Sciences, 142092, Troitsk, Russia

Nitrogen is commonly considered to be an inert material because the N≡N triple bond is the most stable chemical bond known. However, it would be a high energetic material in the case of nitrogen atoms connecting with *single bonds* into a polymeric network. This is because nitrogen exhibits a uniquely large difference in energy between the 1/3 triple and the single bond. Therefore, a large amount of energy releases at the back transformation from the single-bonded to the molecular state: much more than that of the most powerfully energetic materials. In 1985, McMahan and LeSar [1] predicted that at high pressure solid molecular nitrogen would transform to an atomic solid with a single-bonded crystalline structure called polymeric nitrogen. Mailhiot [2] et al proposed that its lattice should have the cubic gauche (*cg-N*) structure –an unusual distortion of the cubic structure. Experimentally, there have been extensive searches for this polymeric nitrogen in the past few years [3-6] under pressures to 270 GPa and in the 10–1000 K temperature range. A new, dark, apparently non-molecular phase has been found above 180 GPa at 80 K [3] and then at room and elevated temperatures [3-6]. Some properties of the black phase are close to that predicted for the polymeric nitrogen: the value equilibrium pressure (about 100 GPa), and a huge hysteresis so that the black phase could be recovered to ambient pressure at low temperatures [3]. On the other hand, this is a narrow-gap semiconductor [3,5] which is in contradiction with the predicted dielectric *cg-N*. There are no convincing data for *cg-N* or another phase with an extending polymeric network. All available optical data indicate an amorphous nature for this material [3-5]. This conclusion is in agreement with our X-ray diffraction measurements performed in the present work, which also revealed no traces of the *cg-N*. The first-principle simulations also indicate that the amorphous nitrogen is most likely a mixture of small clusters of non-molecular phases [7]. New X-ray and Raman data on molecular and polymeric nitrogen as well sodium azide NaN<sub>3</sub> at pressures up to 170 GPa will be presented.

1. A.K. McMahan and R. LeSar, Pressure dissociation of solid nitrogen under 1 Mbar. *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985) 1929
2. C. Mailhiot, L.H. Yang and A.K. McMahan, Polymeric nitrogen. *Phys. Rev. B* **46** (1992) 14419
3. M.I. Eremets et al., Semiconducting non-molecular nitrogen up to 240 GPa and its low-pressure stability. *Nature* **411** (2001) 170
4. A.F. Goncharov et al., Optical evidence for nonmolecular phase of nitrogen above 150 GPa. *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 1262
5. E. Gregoryanz et al., High-pressure amorphous nitrogen. *Phys. Rev. B* **64** (2001) 052103
6. E. Gregoryanz et al., Raman, infrared, and x-ray evidence for new phases of nitrogen at high pressures and temperatures. *Phys. Rev. B* **66** (2002) 224108
7. W.D. Mattson, Thesis. The complex behavior of nitrogen under pressure: ab initio simulation of the properties of structures and shock waves. 2003, University of Illinois at Urbana-Champaign. p. 108.



## ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ И ЭФФЕКТЫ ЛОКАЛИЗАЦИИ ДЕФОРМАЦИИ В СПЛАВАХ ПРИ НАГРУЖЕНИИ СХОДЯЩИМИСЯ УДАРНЫМИ ВОЛНАМИ

И.В. Хомская<sup>1</sup>, В.И. Зельдович<sup>1</sup>, Б.В. Литвинов<sup>2</sup>, Н.П. Пурьгин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*

<sup>2</sup>*Российский Федеральный Ядерный Центр–ВНИИТФ, Снежинск*

Воздействие ударных волн на металлические материалы складывается из практически одновременного влияния нескольких факторов: высокого давления в ударной волне, специфической высокоскоростной деформации, растягивающих напряжений при разгрузке и значительного повышения температуры. Общая деформация состоит из равномерной, осуществляющейся двойникованием и скольжением, и локализованной, вызывающей возникновение трещин отрыва и сдвига, образование пор, полос адиабатического сдвига (ПАС), продольных каналов деформации и других видов газодинамического течения. Локализация деформации обусловлена либо значительными сдвиговыми напряжениями, существенно превышающими динамический предел текучести, либо эффектами взаимодействия ударных волн (УВ) и волн разрежения, создающими гигантские напряжения отрыва. В работе изучены деформационные явления и фазовые превращения в латуни Cu–37%Zn с исходной ( $\alpha+\beta$ )-структурой, титановом сплаве системы Ti–Al–Mo–Cr с ( $\alpha+\beta$ )-структурой, стали Ст3 с феррито–перлитной структурой и бронзе Cu–12,5%Al со структурой  $\beta_1'$ -мартенсита при нагружении сходящимися УВ. Были проведены две серии ударно-волновых экспериментов. В первой серии шаровые образцы из латуни диаметром 40 и 60 мм подвергали квазисферическому импульсному нагружению. Взрыв сферического заряда ВВ инициировали с поверхности в нескольких точках. Давление на поверхности шаров составляло ~50 ГПа, в центре – 200–300 ГПа. Во второй серии диски из титанового сплава и стали, а также цилиндр из бронзы диаметром 60 и 20 мм и высотой 30 мм, соответственно, нагружали плоскими сходящимися УВ, создаваемыми за счет взрыва зарядов ВВ, расположенных на основаниях образцов. Давление по оси образцов при выходе детонационной волны на основания образцов составляло ~50 ГПа, в центре образцов при столкновении ударных волн давление – 110–130 ГПа. Во всех случаях для сохранения образцов система помещалась в массивный корпус. Показано, что деформационное воздействие УВ проявляется в образовании систем микродвойников во всем объеме образцов и возникновении трещин, образовании пор, ПАС и каналов локализованной деформации. Зарождение и рост трещин определяется условиями ударно-волнового нагружения: воздействием первичных и отраженных волн напряжения, а также свойствами материала образцов, их макро- и микроструктурой. Установлена существенная разница в деформационном поведении дисков из стали и титанового сплава, нагруженных по осесимметричной схеме: в стальном диске преобладают откольные явления, в титановом – образуются ПАС, по которым начинается разрушение. Анализ структурных изменений позволил предложить схему течений при локализованной деформации, включающей три типа течения: сдвиговое, струйное (кумулятивное) и вихревое (турбулентное). Показано, что структура исследованных сплавов изменяется вследствие  $\beta \rightarrow \alpha \rightarrow \beta$  и  $\beta_1' \rightarrow \alpha+\gamma \rightarrow \beta_1'$  превращений, плавления и кристаллизации.

Работа выполнена в рамках комплексной программы Президиума РАН “Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий”.

## СТРУКТУРА ФАЗ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ $V_2O_5$

И.П. Зибров<sup>1</sup>, В.П. Филоненко<sup>2</sup>, С.В. Гармаш<sup>1</sup>, М. Сундберг<sup>3</sup>, П.-Э. Вернер<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт кристаллографии РАН, Москва

<sup>2</sup>Институт физики высоких давлений РАН, Троицк

<sup>3</sup>Лаборатория Аррениуса Стокгольмского университета, Стокгольм, Швеция

Пентаоксид ванадия известен в виде одной термодинамически стабильной модификации ( $\alpha$ - $V_2O_5$ ), структура которой может быть представлена слоями четырехгранных пирамид  $(VO_5)$ , соединенных между собой вершинами или ребрами [1]. Известно всего несколько публикаций, связанных с исследованиями пентаоксида ванадия при высоких давлениях. Дифрактограмма новой фазы  $V_2O_5$ , полученной при давлениях от 4.0 до 6.0 ГПа, была впервые опубликована в 1977 году [2]. Через 11 лет В.Л. Волков с соавторами показали, что эта фаза, названная ими  $\beta$ - $V_2O_5$ , формируется при температуре около 600°C в более широком интервале давлений от 3.5 до 9.0 ГПа [3], однако ее структура расшифрована не была. Целью же настоящего исследования являлось более тщательное изучение фазовых переходов пентаоксида ванадия в широком  $P$ - $T$  диапазоне, анализ структуры и термической стабильности фаз высокого давления.

Используя для экспериментов предварительно калиброванные камеры высокого давления “тороид” мы показали, что  $\beta$ - $V_2O_5$  имеет очень широкую область стабильности на фазовой диаграмме. Однако при давлении 8.0–8.5 ГПа и  $T = 650$ – $1100^\circ\text{C}$  нами была получена новая фаза, имеющая, как и  $\beta$ - $V_2O_5$ , темно-красный цвет. Дифрактограмма этой фазы оказалась идентичной дифрактограммам  $B$ - $Nb_2O_5$  и  $B$ - $Ta_2O_5$  [4] и была индцирована в моноклинной сингонии с параметрами:  $a = 11.9705(6)$ ,  $b = 4.6995(2)$ ,  $c = 5.3268(3)$  Å,  $\beta = 104.326(1)^\circ$ , пр.гр.  $C2/c$ ,  $Z = 4$ ,  $V = 290.35(4)$  Å<sup>3</sup>. Структура фазы, названной нами  $B$ - $V_2O_5$ , была уточнена по рентгеновским данным с использованием Rietveld refinement.

Для расшифровки структуры известной фазы высокого давления  $\beta$ - $V_2O_5$  использовали данные рентгеновской, нейтронной и электронной дифракции. Установлено, что фаза кристаллизуется в моноклинной сингонии с параметрами:  $a = 7.11404(2)$ ,  $b = 3.57177(1)$ ,  $c = 6.2846(2)$  Å,  $\beta = 90.069(3)^\circ$ , пр.гр.  $P2_1/m$ ,  $Z = 2$ ,  $V = 159.69(1)$  Å<sup>3</sup>.

Основное отличие фаз высокого давления  $B$ - $V_2O_5$  и  $\beta$ - $V_2O_5$  от  $\alpha$ -фазы заключается в увеличении координационного числа ванадия с 5 до 6 (кислородный октаэдр). Однако структура  $\beta$ - $V_2O_5$ , как и  $\alpha$ - $V_2O_5$ , является слоистой со слабыми связями между слоями, тогда как  $B$ - $V_2O_5$  имеет объемный каркас, построенный из довольно правильных октаэдров. Общим для  $\beta$ - и  $\alpha$ -фаз является наличие короткой ванадильной связи ( $\sim 1.57$  Е) между ванадием и неразделенным кислородом, расположенным на границе между слоями. Показано, что  $\beta$ - $V_2O_5$  является материнской структурой для новой серии ванадиевых бронз. Также в работе обсуждается термическая стабильность фаз высокого давления.

[1] R. Enjalbert, J. Galy, *Acta Cryst.* C **42** (1986) 1467

[2] T. Suzuki, S. Saito, W. Arakawa, *J. Non-Cryst. Solids* **24** (1977) 355

[3] В.Л. Волков, В.Г. Головкин и др., *Изв. АН СССР, Неорг. Матер.* **24** (1988) 1836

[4] I.P. Zibrov, V.P. Filonenko, M. Sundberg, P.-E. Werner, *Acta Cryst.* B **56** (2000) 659

## **ФИЗИКА ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ДАВЛЕНИЙ: СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ И ЗАДАЧИ**

Г.И. Канель<sup>1</sup>, С.В. Разоренов<sup>2</sup>, Г.С. Безручко<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, Москва*

<sup>2</sup>*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

В отличие от газов, твердые тела и жидкости обладают сопротивлением растяжению. Вследствие этого, в конденсированных веществах возможны отрицательные давления. В экспериментах с импульсами ударно-волновой нагрузки наносекундных длительностей удается создавать чрезвычайно большие растяжения твердых тел, при которых величины отрицательных давлений (растягивающих напряжений) могут достигать 15 ГПа и более. Тем самым открываются перспективы изучения полиморфных и фазовых превращений и других явлений в твердых телах в новой экзотической области параметров состояния. В исследованиях такого рода неизбежно встает вопрос об уравнении состояния вещества при столь больших растягивающих напряжениях. Поскольку состояния конденсированного вещества в области растяжения метастабильны, встает вопрос о возможной долговечности этих состояний и влиянии различных структурных факторов на долговечность. Распад или разрушение материала при растяжении определяет его прочность; при этом реализуемое сопротивление разрушению тем выше, чем больше скорость приложения нагрузки (или чем меньше время растяжения). Существует понятие «предельной» или «идеальной» прочности конденсированного вещества, соответствующей напряжению абсолютной потери его устойчивости ( $dp/dV = 0$ ).

В настоящее время опубликованы десятки экспериментальных и теоретических работ, так или иначе связанных с изучением физических свойств вещества при растяжении, совокупность которых позволяет говорить о формировании физики отрицательных давлений. В докладе на основе литературных и собственных данных обсуждаются различные аспекты этой области науки, включая основные задачи исследований, методы генерации больших отрицательных давлений при отражении импульса сжатия от поверхности, результаты измерений прочности твердых тел в различных структурных состояниях в зависимости от скорости деформирования и температуры, некоторые результаты молекулярно-динамического моделирования растяжения кристаллов, возможные способы и результаты исследований сжимаемости в области отрицательных давлений, расчетные и экспериментальные данные о возможности реализации полиморфизма и плавления твердых тел при растяжении.

## **ВЛИЯНИЕ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И ТЕМПЕРАТУР НА ДЕФЕКТНО-ПРИМЕСНЫЙ СОСТАВ МОНОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА**

А.Н. Катруша, О.А. Заневский, С.А. Ивахненко

*Институт Сверхтвердых Материалов им. Бакуля НАНУ, Киев*

Метод термобарической обработки (НРНТ обработки) позволяет интенсивно влиять на дефектно-примесный состав (цвет) монокристаллов природных и синтетических алмазов и, таким образом, значительно повышать потребительскую стоимость алмазов. В работе приведены результаты воздействия высоких давления до 7 ГПа и температуры (до 2300°C) на природные и синтетические алмазы.

Спектры пропускания алмазов в видимом, ближнем ИК диапазоне (400–1000 нм) были получены для исследования поведения центров окраски в алмазах. Кроме того, методом УФ топографии было исследовано зонально-секториальное распределение основных люминесцентных центров (N3, H3) и центров тушения люминесценции (центры А), их трансформация под воздействием термобарической обработки.

Основные результаты применения метода термобарической обработки можно условно разделить на три основные группы: а) результаты по алмазам типов Па и Пб, б) результаты по алмазам типов Ia и Ib, и в) результаты по алмазам переходного типа IaV. В случае а) для коричневых природных алмазов типа Па (концентрация атомов примесного азота до  $10^{18}$  см<sup>-3</sup>) методом ИК спектроскопии установлено отсутствие образования каких-либо ИК активных дефектно-примесных центров при воздействии НРНТ обработки. При этом происходит интенсивный отжиг структурных дефектов (дислокаций и связанных с ними вакансионно-примесных дефектов), образовавшихся вследствие воздействия пластической деформации. Оптически это выражается в увеличенном пропускании в спектральной области 400–600 нм; установлена прямая зависимость между оставшимся после обработки коричневым нацветом и температурой обработки. Существенное изменение цвета происходит начиная с температур 1600°C. Для некоторых кристаллов этого типа, а также для кристаллов типа IaV (случай в)), зафиксировано возникновение после обработки промежуточного розового нацвета, который, по-видимому, вызывается более стабильными к температурному воздействию структурными дефектами, что подтверждается отжигом этого нацвета при повышенных температурах (2300–2400°C). Для случая б) и коричневых природных кристаллов типа Ia изменение дефектно-примесного состава и связанного с этим изменение цвета кристаллов имеет более сложный характер. Основными дефектно-примесными центрами, которые наиболее подвержены процессам декомпозиции и агрегации являются центры: N3, H3, H2, С, А, В, а также дефектно-примесные образования типа плетелитс. Последние частично либо полностью распадаются под воздействием давления и температуры. Изменение концентрации азотных примесных центров А и В находится в пределах точности определения концентрации азота методом ИК спектроскопии. Цветовая гамма алмазов этого типа после обработки включает оттенки желтого, зеленого и оранжевого, различных интенсивностей и комбинаций.

На основании анализа спектров пропускания алмазов в видимом диапазоне и ближней ИК области (400–1000 нм), а также диаграммы хроматичности установлена взаимосвязь между относительной интенсивностью поглощения центров окраски (центры С, N3, H3, H2) и результирующим цветом алмаза. Сформулированы принципы трансформации цвета в алмазах и критерии отбора образцов для получения заданного дефектно-примесного состава (цвета).

## КАТАЛИТИЧЕСКОЕ ВЛИЯНИЕ ФУЛЛЕРЕНОВ НА СИНТЕЗ АЛМАЗОВ ИЗ ГРАФИТА

А.Я. Вуль<sup>1</sup>, В.М. Давиденко<sup>2</sup>, С.В. Кидалов<sup>1</sup>, Ф.М. Шахов<sup>1</sup>, М.А. Яговкина<sup>1</sup>, В.А. Яшин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург

<sup>2</sup>АООТ «Абразивный завод «Ильич»», Санкт-Петербург

Проведено исследование влияния фуллеренов  $C_{60}$  чистотой 99.5%;  $C_{70}$  чистотой 98% и экстракта фуллеренов  $C_{60}+C_{70}$  в соотношении 85:15 на статический синтез алмазов из смеси графита и металлов-катализаторов (эвтектика Ni+Mn) при давлении 4.5–5.5 ГПа и температуре  $\sim 1200^\circ\text{C}$ . Концентрации фуллереновых сокатализаторов варьировались от 0 до 0.3% от массы графита.

После синтеза определяли процент перехода графит–алмаз, проводили рассев алмазов по крупности, и для алмазов определенной крупности проводили исследование прочности и габитуса кристаллов. Параметр кристаллической решетки алмазов определяли рентгенографически. Показано, что при концентрации фуллеренового сокатализатора около 0.1% от массы графита в исходной шихте, вне зависимости от типа используемого сокатализатора, процент перехода графит–алмаз возрастает в 1.3–1.4 раза (рис. 1). Такие значения не противоречат данным полученным ранее в [1]. Установлено, что наличие фуллеренового сокатализатора влияет на распределение алмазов по крупности, это позволяет в определенной степени управлять размером получаемых кристаллов.

Тот факт, что введение различных фуллеренов, приводит к близкому каталитическому эффекту, позволяет предположить, что гипотеза, высказанная в [2] является правильной, и роль фуллеренового катализатора сводится к образованию центров зародышеобразования алмазов в металле-катализаторе.

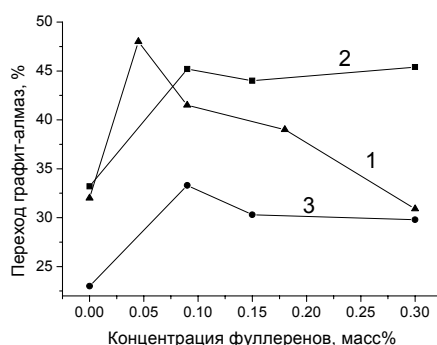


Рис. 1. Процент перехода графита в алмаз в зависимости от концентрации фуллеренового сокатализатора. Тип фуллеренового сокатализатора: 1 – смесь  $C_{60}+C_{70}$ , 2 –  $C_{60}$ , 3 –  $C_{70}$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке программы Минобразования и науки «Управляемый синтез фуллеренов и других атомных кластеров».

[1] А.Я. Вуль, В.М. Давиденко, С.В. Кидалов, С.С. Орданьян, В.А. Яшин. *Письма в ЖТФ* 27(9) (2001) 72

[2] A. Vul', S. Kidalov, S. Kozyrev, V. Davidenko, V. Yashin, S. Ordanyan, V. Lysanov, *Method for production artificial diamonds*. Priority date Aug. 22, 1997, RU1997000114492, Patent RU N2131763

## ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ РАЗУПОРЯДОЧЕННЫХ ГРАФИТОПОДОБНЫХ СТРУКТУР ПРИ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОМ УДАРНОМ СЖАТИИ

А.В. Курдюмов, В.Ф. Бритун, Н.И. Боримчук, А.И. Даниленко, В.В. Ярош

*Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАНУ, Киев*

Рассмотрены физические принципы синтеза нанокристаллических сверхтвердых фаз (НСФ), основанного на реализации прямых фазовых превращений слоистых структур углерода и нитрида бора в существенно неравновесных условиях. Показано, что для получения НСФ наиболее перспективным является разработанный в ИПМ НАН Украины метод высокотемпературного ударного сжатия (ВТУС). Метод основан на использовании специальных добавок, которые позволяют существенно повысить температуру основного вещества в момент прохождения ударной волны до 3000–4000 К при давлениях 30–35 ГПа, а затем резко охладить образовавшиеся фазы высокого давления при разгрузке (со скоростью до  $10^7$  К/с).

Использование метода ВТУС целесообразно для реализации как термически активируемых мартенситных превращений (характерных для высокоупорядоченных исходных структур), так и диффузионных превращений разупорядоченных структур типа турбостратных. Применение этого способа позволило впервые получать нанокристаллические порошки кубического нитрида бора [1], алмаза с лонсдейлитом [2], алмаза с промежуточной аморфной фазой [3], тройные алмазоподобные фазы в системе В–С–N [4]. При этом давление ударного сжатия не превышало 35 ГПа, а выход плотных фаз составлял более 50 мас. %.

Основное внимание в докладе уделено новым данным о структуре промежуточной аморфной фазы углерода (*am-C*) и нанокристаллических порошков кубического нитрида бора (*c-BN*). Обе эти фазы образуются из одномерно разупорядоченных исходных структур по диффузионным механизмам.

Установлено, что *am-C* имеет плотность 2.7–3.1 г/см<sup>3</sup>, промежуточную между плотностями графита и алмаза. Ее структура характеризуется ближним порядком гипотетической структуры H–6, предложенной в работе [5], с трехмерным распределением  $sp^2$  С–С связей в пределах пяти координационных сфер ( $R \approx 0,3$  нм). Матрица *am-C* содержит включения алмаза размерами до 50 нм. Прочность  $sp^2$ -связей и их трехмерное распределение в пространстве предопределяет высокие механические свойства углеродных материалов на основе *am-C*.

Обычно *c-BN* образуется в смеси с вюртцитной фазой, причем суммарный выход плотных фаз и относительное содержание *c-BN* возрастает с увеличением дисперсности и степени одномерной разупорядоченности исходной структуры; размеры кристаллических зерен *c-BN* не превышают 50 нм.

- [1] Н.И. Боримчук, В.Б. Зелявский, А.В. Курдюмов и др. *Докл. АН СССР* **306** (1989) 1381
- [2] А.В. Курдюмов, Н.Ф. Островская, А.Н. Пилянкевич. *Порошк. металлургия* №1 (1988) 34
- [3] Н.И. Боримчук, В.Б. Зелявский, А.В. Курдюмов и др. *Докл. АН СССР* **321**(1991) 95
- [4] А.В. Курдюмов, В.Л. Соложенко, М. Губачек и др. *Порошк. металлургия* №9-10 (2000) 53
- [5] A.J. Liu, M.L. Cohen, K.C. Nass, M.A. Tamor. *Phys. Rev.* В **43** (1991) 6742

# ИССЛЕДОВАНИЕ КЛАТРАТНЫХ ФАЗ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ В СИСТЕМЕ ТЕТРАГИДРОФУРАН–ВОДА. НОВЫЙ СТРУКТУРНЫЙ ТИП КЛАТРАТНЫХ ГИДРАТОВ

А.В. Курносов<sup>1</sup>, А.Ю. Манаков<sup>1</sup>, В.Ю. Комаров<sup>1</sup>, В.И. Воронин<sup>2</sup>, А.Е. Теплых<sup>2</sup>,  
С.В. Горайнов<sup>3</sup>, А.Ю. Лихачева<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, Новосибирск

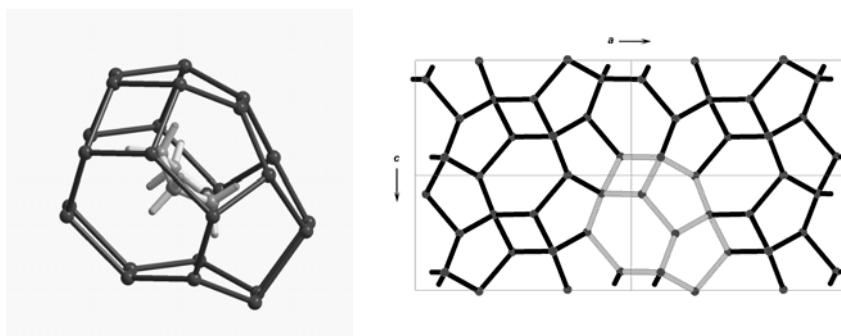
<sup>2</sup>Институт Физики Металлов УрО РАН, Екатеринбург

<sup>3</sup>Институт минералогии и петрографии СО РАН, Новосибирск

Методами КР спектроскопии и оптической микроскопии с использованием алмазных наковален и порошковой нейтронодифрактометрии с применением аппарата высокого давления типа поршень–цилиндр исследованы фазы высокого давления в системе ТГФ–H<sub>2</sub>O (в случае нейтронной дифракции – ТГФ(D<sub>8</sub>)–D<sub>2</sub>O).

По данным нейтронной дифрактометрии определена неизвестная ранее структура клатратного гидрата высокого давления. Пространственная группа – *Pnma*, параметры элементарной ячейки  $a = 12.54 \text{ \AA}$ ,  $b = 11.44 \text{ \AA}$ ,  $c = 6.60 \text{ \AA}$ . Открытый структурный тип является новым как для клатратных (газовых) гидратов, так и для других топологически родственных соединений включения (полуклатратных гидратов, клатрасилов, каркасных алюмосиликатов). Водный каркас нового структурного типа состоит из пространство-заполняющих 14-гранных полостей, в которые включены молекулы “гостя” (см. рис.). Отметим, что пока известно всего 8 структурных типов клатратных гидратов, три из которых – только при высоких давлениях.

По данным КР спектроскопии и оптической микроскопии исследована фазовая диаграмма системы ТГФ–H<sub>2</sub>O до 5 ГПа (к моменту наших исследований была известна фазовая диаграмма до 1.5 ГПа, показано существование трех гидратных фаз). При давлении порядка 3 ГПа нами обнаружена верхняя граница гидратообразования, связанная с разложением гидрата на твёрдый ТГФ и лед VII под действием давления. Показано отсутствие в системе новых гидратных фаз. По спектральным данным сделаны предположения о свойствах и составе третьей фазы высокого давления, которые легли в основу расшифровки её структуры по порошковым данным.



Новая пространство-заполняющая полость (вершины – атомы кислорода, рёбра – водородные связи) с включённой молекулой ТГФ и ее упаковка в пространстве (проекция вдоль оси *c*).

Работа выполнена при поддержке интеграционного проекта № 147 (природные и синтетические газовые гидраты), Госконтракта № 40.012.1.1.1150., проекта №4 программы ОФН РАН.

## ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СОЕДИНЕНИЯ $\text{CaCo}_2$ , СИНТЕЗИРОВАННОГО ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ. ЭКСПЕРИМЕНТ И ТЕОРИЯ

М.М. Кириллова<sup>1</sup>, Л.В. Номерованная<sup>1</sup>, А.В. Махнёв<sup>1</sup>,  
М.В. Магницкая<sup>2</sup>, А.В. Цвященко<sup>2</sup>, Л.Н. Фомичева<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, Троицк

В работе экспериментально и теоретически исследованы оптические свойства нового магнитного соединения  $\text{CaCo}_2$  со структурой  $C15$ , синтезированного при высоком давлении [1]. В диапазоне энергий фотона  $\hbar\omega = 0.2 - 4.5$  эВ оптические измерения выполнены методом эллипсометрии; в области  $4 - 10$  эВ измерена отражательная способность, а затем с использованием соотношения Крамерса – Кронига рассчитана диэлектрическая функция. Таким образом, для  $\hbar\omega = 0.2 - 10$  эВ получены данные об оптических постоянных  $n(\omega)$  и  $k(\omega)$ , диэлектрических функциях  $\epsilon_1(\omega)$  и  $\epsilon_2(\omega)$ , оптической проводимости  $\sigma(\omega)$ , отражательной способности  $R(\omega)$  и функции характеристических потерь энергии электронов  $L(\omega)$ . Установлено, что в исследованном интервале спектра оптические характеристики  $\text{CaCo}_2$  определяются механизмом межзонного возбуждения электронов.

Перечисленные величины были рассчитаны независимо от эксперимента — на основе теории функционала плотности линейным методом присоединенных плоских волн с помощью программного комплекса WIEN2k. Вычислены и проанализированы парциальные вклады в оптическую проводимость  $\sigma(\omega)$  от различных пар энергетических зон, что позволило объяснить происхождение особенностей оптического спектра поглощения и определить их связь с группами электронов определенной симметрии, связанных с атомами Ca или Co.

Проведенные микроскопические расчеты правильно воспроизводят спектральный ход оптической проводимости и отражательной способности  $\text{CaCo}_2$ , в частности, наличие интенсивного пика поглощения асимметричного вида на кривой  $\sigma(\omega)$  с максимумом при энергии 1.1 эВ. В спектре оптического поглощения  $\text{CaCo}_2$ , кроме указанного основного пика поглощения, в УФ области наблюдается также двойная структура с максимумами при 5 эВ и 6 эВ. На основе полученных теоретических результатов можно сделать вывод, что доминирующий вклад в эту структуру вносят электронные переходы с глубоких обменно-расщепленных спиновых подзон  $d$  Co ( $\Delta_{\text{exc}} \sim 0,75$  эВ) в состояния  $d$  Ca, расположенные выше уровня Ферми. Интенсивность электронных переходов обеспечивается ( $p$ - $d$ )-гибридизацией электронов. Наблюдаемая на опыте энергетическая раздвижка двух пиков хорошо согласуется с расчетными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 04-02-16061) и Голландско-российского гранта № 047.016.005. Теоретические расчеты выполнены на вычислительной технике Межведомственного суперкомпьютерного центра.

[1] А.В. Цвященко, Л.Н. Фомичева, М.В. Магницкая и др. *Письма ЖЭТФ* **68** (1998) 868



## НЕПРОСТОЕ ПОВЕДЕНИЕ ПРОСТЫХ МЕТАЛЛОВ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Е.Г. Максимов<sup>1</sup>, М.В. Магницкая<sup>2</sup>, В.Е. Фортов<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН*

<sup>2</sup>*Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН*

<sup>3</sup>*Институт теплофизики экстремальных состояний РАН*

Некоторые простые металлы, включая щелочные и щелочноземельные *s*-элементы, демонстрируют при высоких давлениях достаточно необычное поведение. Многие из них при сжатии испытывают фазовые переходы, переходя при этом во все менее и менее плотноупакованные структуры. Часто это крайне сложные анизотропные структуры, которые ранее были известны лишь для бинарных сплавов переходных металлов, либо вообще являются уникальными. Одна из таких «странных» структур с 16 атомами в элементарной ячейке реализуется, например, в литии при  $P > 48$  ГПа.

Некоторые простые одно- и двухвалентные металлы проявляют под давлением также необычные электрические свойства, превращаясь в полуметаллы или даже полупроводники. В докладе будут подробно представлены как экспериментальные свидетельства непростых свойств простых металлов, так и различные теоретические подходы к их объяснению, основанные, главным образом, на первопринципных расчетах.

# ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И СТАБИЛЬНОСТЬ ГИДРИДА ФУЛЛЕРЕНА $C_{60}H_{36}$ ПРИ ДАВЛЕНИИ ДО 12 ГПа

К.П. Мелетов, И.О. Башкин

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

Измерены спектры фотолюминесценции [ФЛ] и комбинационного рассеяния света [КРС] гидрида фуллера  $C_{60}H_{36}$  при давлении до 12 ГПа. Образцы  $C_{60}H_{36}$  были изготовлены гидрированием исходного фуллера  $C_{60}$  при высоком давлении водорода при температуре  $T = 700$  К и  $P = 3$  ГПа в течение 24 часов.

Спектр КРС гидрида фуллера  $C_{60}H_{36}$  имеет развитую структуру и содержит более 120 пиков (рис. 1). Количество пиков в спектре КРС указывает на то, что образцы гидридов содержат как минимум два различных изомера  $C_{60}H_{36}$ . Детальное сравнение экспериментальных фоновых частот с расчетным спектром фононов показывает, что образцы являются смесью пяти изомеров  $C_{60}H_{36}$  различной симметрии. Барическая зависимость фоновых мод  $C_{60}H_{36}$  является монотонно растущей, однако при  $\sim 0.7$  и  $\sim 6$  ГПа имеет место изменение барических коэффициентов некоторых мод. Следует особенно отметить, что барическая зависимость C–H колебательной моды при  $\sim 6$  ГПа изменяется с растущей на убывающую.

Спектр ФЛ  $C_{60}H_{36}$  начинается от  $\sim 2.6$  эВ и имеет хорошо развитую структуру. Она заметно отличается от структуры спектра ФЛ исходного  $C_{60}$ , начало которого к тому же сдвинуто в красную сторону примерно на 1 эВ. Барический сдвиг спектра ФЛ довольно мал, однако при  $P \geq 6$  ГПа он заметно возрастает.

Барическая зависимость фоновых мод  $C_{60}H_{36}$  и барическая зависимость спектра ФЛ обратимы при разгрузке. Особенности в барической зависимости фоновых мод при  $\sim 0.7$  и  $\sim 6$  ГПа, возможно, связаны со структурными фазовыми переходами.

Авторы выражают благодарность РФФИ (проект № 03-02-16011) и ГНТП “Управляемый синтез фуллеренов и других атомных кластеров”.

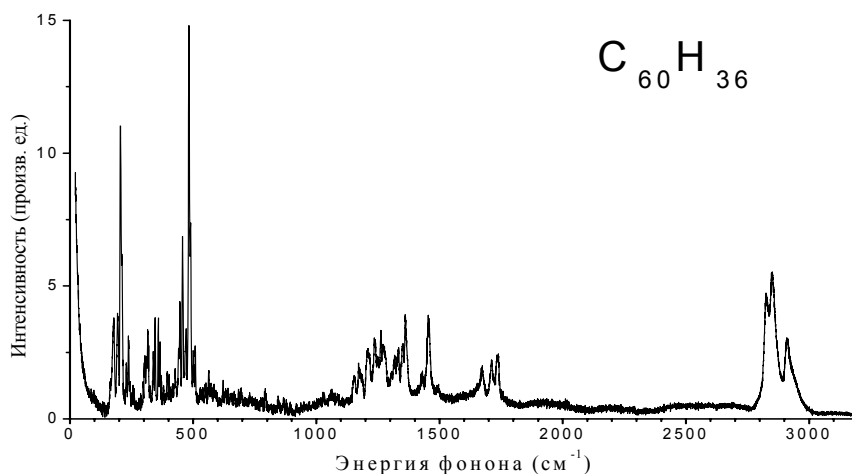


Рис. 1. Спектр КРС гидрида фуллера  $C_{60}H_{36}$

## СТРУКТУРНЫЕ ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В НЕКОТОРЫХ БИНАРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

А.Ю. Моллаев, Р.К. Арсланов, Л.А. Сайпулаева, С.Ф. Габибов

*Институт физики Дагестанского научного центра РАН, Махачкала*

С целью определения влияния концентрации, типа носителей и кристаллографической ориентации образцов на положение характеристических точек и параметров фазового перехода на монокристаллических образцах CdTe, CdAs<sub>2</sub>, и InAs при подъеме и сбросе давления одновременно измерены эффект Холла и удельное электросопротивление. Измерения проводились в области комнатных температур при гидростатических давления до 9 ГПа и магнитных полях до 5 кЭ в аппарате высокого давления типа «то-роид» по методике, описанной в работе [1]. Исследованные образцы имели следующие параметры: образцы *p*-CdTe с  $p=8 \cdot 10^{12} \div 10^{16} \text{ см}^{-3}$ ,  $\rho=8.6 \div 40 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ , образцы *n*-CdAs<sub>2</sub> были ориентированны по кристаллографическим направлениям [100] и [001] и имели следующие параметры:  $n=3-4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ,  $\rho=7 \div 11 \text{ Ом}\cdot\text{см}$  и  $n=1.1 \div 1.8 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3}$ ,  $\rho=27 \div 40 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ , образцы *n*-InAs с  $n=10^{15} \div 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ,  $\rho=1.2 \cdot 10^{-2} \div 2.4 \cdot 10^{-3} \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ; образцы *p*-InAs<Mn,Cr>, *p*-InAs<Mn> и *p*-InAs<Zn> – с  $p=3.5 \cdot 10^{15} \div 1.9 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ,  $\rho=0.17-1.3 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ . По данным эффекта Холла и удельного электросопротивления в области фазового перехода было выяснено, что в InAs и CdTe имеет место структурный фазовый переход полупроводник - металл, а *n*-CdAs<sub>2</sub> полупроводник-полупроводник. Во всех исследованных образцах *n*- и *p*-InAs при подъеме и сбросе давления на кривых  $\rho(P)$  и  $R_H(P)$  наблюдается обратимый структурный фазовый переход при подъеме  $P=6.9 \text{ ГПа}$  и при сбросе давления  $P=4.2 \text{ ГПа}$ . С ростом давления удельное сопротивление и коэффициент Холла для образцов *n*-CdAs<sub>2</sub>, вырезанных по направлению [100], падают, а на  $\rho(P)$  и  $R_H(P)$  обнаружены аномалии в виде двух максимумов при  $P=3 \text{ ГПа}$  и  $P=5.5 \text{ ГПа}$ . Барические зависимости  $\rho(P)$  для образцов ориентированных по направлению [001] носят более сложный характер. С увеличением давления удельное электросопротивление растет. На кривых  $\rho(P)$  выявлено три максимума:  $P=1.8 \text{ ГПа}$ ,  $3 \text{ ГПа}$  и  $5.5 \text{ ГПа}$ . Максимумы при  $1.8 \text{ ГПа}$  и  $3 \text{ ГПа}$  связаны с глубокими донорными уровнями в CdAs<sub>2</sub> расположенными на расстоянии  $\varepsilon_{2c}=0.26 \text{ эВ}$  и  $\varepsilon_{3c}=0.42 \text{ эВ}$  от дна зоны проводимости. Максимум при  $P=5.5 \text{ ГПа}$  идентифицирован как структурный фазовый переход при подъеме давления. В CdAs<sub>2</sub> наблюдается фазовый переход и при сбросе давления при  $P=3.6 \text{ ГПа}$ . В *n*- и *p*-CdTe обнаружено 2 фазовых перехода  $P=1.8 \text{ ГПа}$  и  $P=3 \text{ ГПа}$  при подъеме давления и один при  $P=2 \text{ ГПа}$  при сбросе давления. Согласно теории формирования гетерофазных структур, по методике, изложенной в [1] определены характеристические точки фазового перехода. Для образцов CdTe, CdAs<sub>2</sub> и InAs согласно [1] рассчитана динамика изменения фазового состава фазы 1 с давлением в области фазового перехода. Анализ результатов показывает, что положение фазового перехода, характеристических точек и параметров гистерезиса не зависит от типа носителей, лигатуры и ориентации образцов и определяется структурой кристалла.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (Проекты №02-02-17888 и №03-02-17677).

[1] А.Ю.Моллаев, Л.А.Сайпулаева, Р.К.Арсланов, С.Ф.Маренкин. *Неорганические материалы*. **37** (2001) 405

# ТЕРМОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В ПРЯМОЗОННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ В ОБЛАСТИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

С.В. Овсянников, В.В. Щенников

*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*

Халькогениды свинца (PbTe, PbSe, PbS) являются прямозонными полупроводниковыми материалами, которые широко используются в датчиках инфракрасного излучения, термоэлектрических устройствах, фотосопротивлениях, лазерах и других электронных устройствах [1]. Под действием давления 2.5–6 ГПа и 12–21 ГПа эти материалы испытывают фазовые переходы, соответственно, из структуры типа NaCl в GeS, а затем в CsCl [1-4].

В настоящей работе методика исследования термомагнитных эффектов в полупроводниковых микрообразцах под давлением, разработанная в работах [5-8], была применена для исследования параметров электронной структуры халькогенидов свинца под давлением до 20 ГПа. Исследовались продольный и поперечный эффекты Нернста–Эттингсгаузена и эффект Маджи–Риги–Ледюка в микрообразцах (200×200×20 мкм) халькогенидов свинца: *n*-PbTe, *p*-PbSe, *p*-PbS, также исследовались и гальваномагнитные эффекты (поперечное магнитосопротивление). Было показано, что термомагнитные эффекты позволяют напрямую определять подвижность и параметр рассеяния носителей заряда, определять тип полупроводниковой щели (прямая или непрямая). В работе установлен переход в бесщелевое состояние при давлении ~3 ГПа, непрямая минимальная полупроводниковая щель в GeS-фазе PbTe и PbSe, изменение механизма рассеяния заряда под давлением в PbSe. Показаны преимущества термомагнитных эффектов при изучении параметров электронной структуры полупроводников перед традиционными – гальваномагнитными эффектами.

Работы выполнены при частичной поддержке РФФИ (грант 01-02-17203), US CRDF (Gr. No. TGP-656, TGP-1125), и INTAS (Ref. Nr. 03-55-629).

- [1] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe и PbS*. М. Наука. 1968. 384 с
- [2] T. Chattopadhyay, H.G. Von Schnering, W.A. Grosshans, W.A. Holzapfel. *Physica BC* **139–140** (1986) 356
- [3] В.В. Щенников, С.В. Овсянников, А.Ю. Деревсков. *ФТТ* **44** (2002) 1762
- [4] S.V. Ovsyannikov, V.V. Shchennikov, S.V. Popova, A.Y. Derevskov. *physica status solidi (b)* **235** (2003) 521
- [5] В.В. Щенников, С.В. Овсянников. *Письма в ЖЭТФ* **74** (2001) 546
- [6] V.V. Shchennikov, S.V. Ovsyannikov. *Solid State Comm.* **121** (2002) 323
- [7] S.V. Ovsyannikov, V.V. Shchennikov. *Physica E* **17** (2003) 546
- [8] V.V. Shchennikov, S.V. Ovsyannikov. *physica status solidi (b)* **235** (2003) 288

## PHASE DIAGRAMS OF MINERALS FROM *AB INITIO* SIMULATIONS

Artem R. Oganov

*Laboratory of Crystallography, Department of Materials, ETH Zurich, CH-8092 Zurich, Switzerland*

Rapid progress of quantum-mechanical approaches to the study of solids has resulted in a number of breakthroughs, enabling (among many other things) the studies of lattice dynamics, anharmonicity, and thermodynamic properties as a function of pressure and temperature. Here we discuss applications of one particular methodology, density-functional perturbation theory [1], to these problems. We will show that this methodology provides a powerful and accurate tool for studying high-pressure phase transformations in crystals.

The applications illustrated will include minerals relevant to the Earth's lower mantle. Typical mineralogical models of the Earth's lower mantle are very simple: e.g., 75 vol.% (Mg,Fe)SiO<sub>3</sub> perovskite, 20 vol.% (Mg,Fe)O, 5 vol.% CaSiO<sub>3</sub> perovskite [2]. However, these models have been challenged by several groups: e.g., decomposition of MgSiO<sub>3</sub> [3] and CaSiO<sub>3</sub> [4] perovskites has been proposed. Consequently, CsCl-structured CaO and various phases of SiO<sub>2</sub> were suggested as possible mantle-forming minerals. Using density-functional perturbation theory [1], we have studied lattice dynamics and high-pressure phase diagrams of MgO [5], SiO<sub>2</sub> [6], and MgSiO<sub>3</sub> [7]. We find [5] that MgO remains in the NaCl-type structure at all conditions present within the Earth. The calculated phase diagram of SiO<sub>2</sub> [6] allowed us to predict the depths of seismic discontinuities that would appear within the lower mantle if SiO<sub>2</sub> phases were present in significant amounts. However, these depths (1410 and 2210 km) do not correspond to any observed discontinuities, suggesting that SiO<sub>2</sub> polymorphs are not present, at least as major phases, in the lower mantle. MgSiO<sub>3</sub> perovskite is found [7] to be stable with respect to decomposition into oxides; pressure and temperature only increase its stability. Using electron localisation function [8] and Bader theory [9] we analyse chemical bonding in these materials under pressure. In particular, we analyse the pressure-driven breakdown of close packing in SiO<sub>2</sub>.

We thank ETH Zurich for support, G.D. Price and M.J. Gillan for fruitful collaborations. Supercomputer facilities were provided by CSCS (Manno, Switzerland) and CSAR (Manchester, U.K.).

- [1] S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, P. Gianozzi, *Rev. Mod. Phys.* **73** (2001) 515
- [2] G. Fiquet, *Z. Krist.* **216** (2001) 248
- [3] S.K. Saxena, L.S. Dubrovinsky, P. Lazor, Y. Cerenius, P. Häggkvist, M. Hanfland, J. Hu, *Science* **274** (1996) 1357
- [4] T. Yamanaka, K. Kittaka, T. Nagai, *J. Mineral. Petrol. Sci.* **97** (2002) 144
- [5] A.R. Oganov, M.J. Gillan, G.D. Price, *J. Chem. Phys.* **118** (2003) 10174
- [6] A.R. Oganov, M.J. Gillan, G.D. Price (2004) *submitted*
- [7] A.R. Oganov et al. (2004) *in preparation*
- [8] A.D. Becke, K.E. Edgecombe, *J. Chem. Phys.* **92** (1990) 5397
- [9] R.F.W. Bader, *Atoms in Molecules. A Quantum Theory*, 1990 (Oxford: Oxford University Press) 438 pp.

## ФУЛЛЕРЕНА ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

Ю.А. Осипьян

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

60 двойных связей в молекуле фуллера обуславливают его высокую химическую активность. Уже при атмосферном давлении облучение светом ведет к димеризации  $C_{60}$ . Приложение высоких давлений расширяет многообразие полимерных фаз  $C_{60}$ . На  $T$ - $P$  диаграмме  $C_{60}$  определена нижняя граница области обратимой полимеризации  $C_{60}$  – прямая с наклоном около 43 К/кбар, экстраполируемая к нормальным условиям. Вблизи нижней границы полимеризации, где полимерные фазы образуются посредством соединения молекул  $C_{60}$  циклобутановыми кольцами, образуется линейный полимер  $C_{60}$ , что понижает симметрию исходной ГЦК решетки до орторомбической. При температурах выше 400°C и давлениях до 40–45 кбар устойчива тетрагональная фаза, где молекулы  $C_{60}$  соединены в прямоугольные сетки. В интервале 45–80 кбар соединение молекул  $C_{60}$  в гексагональные сетки ведет к образованию ромбоэдрической фазы. Верхние границы  $T$ - $P$  области обратимой полимеризации определены приблизительно около 85 кбар и 750°C. Выше 800°C молекулы  $C_{60}$  теряют устойчивость, и фуллерит быстро переходит в атомарные формы углерода. Температурно-кинетический характер превращений в  $C_{60}$  позволяет получить путем коротких (до 2 мин) обработок в области 80–140 кбар и  $T < 2000^\circ\text{C}$  набор высокоплотных состояний, включающий три кристаллические и две аморфные фазы. Полагают, что в предельных условиях обработки молекулы  $C_{60}$  объединяются не только [2+2] циклами, но и иными способами вплоть до слияния и частичного разрушения. Продукты такой обработки в исходную ГЦК фазу мономера  $C_{60}$  с помощью отжига при атмосферном давлении обычно не возвращаются.

Термоактивируемый характер превращений в  $C_{60}$  ярко проявился в опытах по ударному сжатию  $C_{60}$  до 200 кбар (начальная температура – комнатная или 77 К, характерные времена  $< 2$  мкс). При давлении в ударной волне около 100 кбар проводимость  $C_{60}$  скачком возрастает на 6–8 порядков, а при разгрузке возвращается к исходной. После опытов  $C_{60}$  сохраняет исходную структуру, но с уменьшенным параметром ГЦК решетки. Таким образом, при ударном сжатии  $C_{60}$  ведет себя как полупроводник с резко уменьшающейся шириной запрещенной зоны, но полимеризации не происходит.

В атмосфере газообразного водорода при повышенных температурах фуллерены реагируют с водородом. При давлениях до 150 атм реакция  $C_{60}$  с водородом ограничивается образованием устойчивых конфигураций  $C_{60}H_{18}$ ,  $C_{60}H_{24}$ ,  $C_{60}H_{36}$ , которые известны и как продукты обменных реакций при атмосферном давлении. Повышенные давления до 30–70 кбар позволяет получать продукты, в которых водород находится, как минимум, в двух состояниях: в виде водорода, присоединенного на ковалентные связи и в форме молекулярного водорода, растворенного в междуузлиях ОЦК или ГЦК кристаллической решетки  $C_{60}H_x$ . Насыщение молекулы  $C_{60}$  водородом при варьировании  $T$ - $P$  параметров синтеза приближается к предельному  $C_{60}H_{60}$ . Обработка углеродных наноматериалов – нанотрубок и нановолокон – под давлением водорода до 90 кбар позволяет получать продукты с высоким, до ~7 вес.%, содержанием водорода, где водород, в дополнение к известным способам, может поглощаться и в форме молекулярного раствора. Таким образом, исследования под давлением открывают новый раздел в физической химии углерода.

## ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ЛИТИЯ, НАТРИЯ, КАЛЬЦИЯ И АЛЮМИНИЯ В УСЛОВИЯХ СТУПЕНЧАТОГО СЖАТИЯ ДО 2 Мбар

В.И. Постнов, В.Е. Фортов, В.В. Якушев, И.В. Ломоносов, К.Л. Каган, Д.В. Шахрай,  
В.В. Авдонин

*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

Измерена удельная электропроводность  $\rho$  металлических лития [1,2], натрия, кальция и алюминия в условиях ударного сжатия до давления  $P = 2,1$  Мбар. Образцы металлов в виде фольги, а также манганиновые датчики давления располагались между слоями изолятора. Для расчетов реализуемых в экспериментах температуры и плотности металлов, использовали их полуэмпирические многофазные уравнения состояния. В опытах использовали квазиизэнтропический (ступенчатый) режим динамического нагружения с целью минимизации ударно-волнового разогрева.

Зарегистрировано аномальное для “простых” металлов увеличение электросопротивления  $R$  лития почти на два порядка при давлении выше 400 кбар. При достижении давления 1.9–2.1 Мбар  $R$  лития возвращалось к исходному значению. При расчете удельного сопротивления  $\rho$  учитывалось влияние проводимости окружающей образец среды (тефлон, полиэтилен) В районе 1.0 Мбар обнаружена типичная для полупроводников или диэлектриков зависимость  $\rho$  ударно-сжатого лития от расчетной температуры. Таким образом, можно говорить о формальной регистрации “диэлектризации” лития при 500 кбар, а затем о его “металлизации” в районе 2 Мбар.

Качественно зависимость  $R(P)$  для натрия при сжатии до давления 1.3 Мбар такая же как для лития, но рост его величины составляет всего в 6 раз.

В диапазоне давлений до 580 кбар при разных начальных температурах в районе 400 кбар обнаружен излом на кривой зависимости электросопротивления кальция, связанный, по мнению авторов [3], с переходом кальция в полупроводниковое состояние. С целью исследования этого явления нами была измерена его электропроводность в условиях ударно-волнового сжатия. Оказалось, что сопротивление ударно-сжатых образцов почти на порядок выше, чем в исходном состоянии. При снятии давления электросопротивление возвращалось к исходному значению, что говорит о сохранении физических свойств образца. При этом в силу специфики экспериментов не удалось, по-видимому, войти в область фазовой диаграммы, отвечающей полупроводниковому состоянию, поскольку вследствие необратимого ударно-волнового разогрева ударная адиабата лежит выше полупроводниковой области.

Проводимость алюминия в условиях ступенчатого сжатия до 1.3 Мбар уменьшается примерно в 1.5 раза при действии только первой волны (5–20 ГПа), оставаясь в дальнейшем за время эксперимента неизменным, что является свидетельством ее зависимости, в отличие от лития, натрия и кальция, главным образом от теплового воздействия ударного сжатия.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №03-02-16322 и Комплексной программы РАН «Физика и химия экстремальных состояний вещества» 2001-2003 г.

1. V.E. Fortov et al., *JETP Lett.*, **70** (1999) 628
2. V.E. Fortov et al., *JETP Lett.*, **74**, (2000) 458
3. R.A. Stager, H.G. Drickamer, *Phys. Rev.*, **131** (1963) 2524

# СТИМУЛИРОВАНИЕ ГЕТЕРОГЕННОГО ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА В ОБЛАСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ

М.А. Серга, С.А. Ивахненко

*Институт сверхтвердых материалов им. В.Н. Бакуля НАНУ, Киев*

Для выращивания монокристаллов алмаза методом температурного градиента, при небольшом количестве выращиваемых одновременно кристаллов, в качестве затравок используют зерна шлифпорошков синтетического алмаза. В процессе кристаллизации происходит эпитаксиальный рост алмаза на затравке. При выращивании большого количества кристаллов с высокой плотностью затравок, ( $0.1 \div 0.25 \text{ мм}^{-2}$ ) возникает потребность стимулировать зародышеобразование алмаза с заданной плотностью на подложке, потому что сборка ростовых ячеек с использованием алмазных затравок оказывается исключительно сложной процедурой. Гетерогенное зародышеобразование алмаза в требуемых местах подложки позволяет значительно повысить эффективность технологии получения большого количества монокристаллов алмаза высокого качества размером  $1.5 \div 2.5 \text{ мм}$  в течение одного цикла выращивания.

Проблема стимулированного зародышеобразования может быть решена созданием значительных пересыщений растворителя углеродом за счет интенсивного теплоотвода в заданных местах подложки, на которой происходит рост кристаллов алмаза. В нашей работе это достигалось путем размещения теплоотводов в подложке. Для этого в рабочем объеме ячейки в местах контакта подложки со сплавом–растворителем располагались цилиндрические теплоотводы, выполненные из различных материалов – никеля, железа,  $\text{В}_4\text{С}$ ,  $\beta\text{-SiC}$ , которые имеют теплопроводность намного выше, чем материал подложки. Таким образом, теплоотводы стимулировали гетерогенное образование алмаза в условиях температурного градиента в рабочем объеме.

В рамках исследований расчетным путем методом конечных элементов было определено распределение температуры в рабочем объеме ячейки и концентрация углерода в сплаве-растворителе при использовании теплоотводов в зависимости от их диаметра и длины.

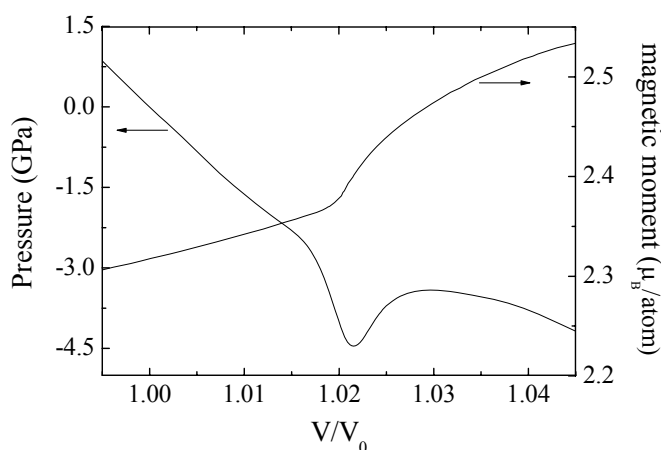


# ПОТЕРЯ КРИСТАЛЛОМ $\alpha$ - ЖЕЛЕЗА МЕХАНИЧЕСКОЙ УСТОЙЧИВОСТИ В ОБЛАСТИ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ДАВЛЕНИЙ

Г.В. Синько, Н.А. Смирнов

РФЯЦ – ВНИИТФ, Снежинск

Для кристаллов  $\alpha$  - железа, обладающих ферромагнитными свойствами и имеющих объемно-центрированную кубическую структуру (*bcc FM*), с помощью детальных первопринципных расчетов электронной структуры обнаружено существование при относительно небольших отрицательных давлениях области удельных объемов, в которой  $dP/dV > 0$ . В расчетах мы использовали хорошо зарекомендовавший себя в наших предыдущих работах метод FPLMTO [1]. Обменно-корреляционный функционал включал градиентные поправки. Сетка для интегрирования по обратному пространству линейным методом тетраэдров строилась в зоне Бриллюэна, имеющей форму призмы, путем разбиения каждого ребра на 50 частей. Варьирование густоты сетки не привело к существенному изменению результатов. Рисунок демонстрирует зависимость давления и удельного магнитного момента от объема в области аномалии,



Давление и удельный магнитный момент  $\alpha$  -железа в области аномалии в зависимости от относительного объема.

где идет интенсивная перестройка энергетического спектра кристалла, сопровождающаяся почти одновременным возникновением восьми электронных топологических переходов. В качестве  $V_0$  мы используем вычисленное в данной работе значение удельного объема при  $T=0$  и  $P=0$ . Расчеты показали, что в интервале  $0.83 \leq V/V_0 \leq 1.2$  структура *bcc FM* испытывает 12 ЭТП. Восемь из них происходят с изменением удельного объема в пределах одного процента, что говорит о резкой перестройке энергетического спектра, которая и приводит к потере механической устойчивости кристалла. В процессе перестройки резко меняется соотношение между количеством электронов с положительной и отрицательной проекцией спина, что приводит к почти скачкообразному изменению магнитного момента кристалла (см. рисунок). Было бы чрезвычайно интересно экспериментально исследовать кристаллы  $\alpha$  -железа при отрицательных давлениях и низких температурах с целью выявления необычного поведения их упругих свойств. Для этого очень полезным может оказаться новый метод измерения скорости звука, предложенный в [2].

Работа выполнена при поддержке МНТЦ (проект №1181) и Российского фонда фундаментальных исследований (грант 04-02-17292).

- [1] S.Yu. Savrasov, D.Yu. Savrasov, *Phys. Rev. B* **46** (1992) 12181
- [2] Г.С. Безручко, Г.И. Канель, С.В. Разоренов, *ТВТ* **41**(2) (2004)

# СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕРМОДИНАМИКА ПЛАВЛЕНИЯ ПОЛИМЕРОВ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

В.Ф. Скородумов

*Московский государственный текстильный университет им. А.Н.Косыгина, Москва*

Адекватное описание термодинамики плавления полимеров под давлением весьма актуально. Существует ряд теорий, описывающих плавление полимеров под давлением, однако задача настолько сложна, что в настоящее время нет единой законченной теории, позволяющей предсказывать термодинамические свойства полимеров при переходе из упорядоченного состояния в расплав при высоких давлениях.

Развиваемая нами статистико-термодинамическая теория плавления полимеров [1,2] корректно описывает плавление полимеров как при атмосферном, так и при повышенных давлениях. Согласно теории, температура плавления  $T_m$  полимеров должна асимптотически увеличиваться с ростом давления  $P$ . Линия плавления полимера с более высокой молекулярной массой может быть получена параллельным переносом вдоль оси температур линии плавления полимера с более низкой молекулярной массой. Эти и другие предсказания хорошо согласуются с экспериментальными данными по плавлению полимеров под давлением. Более того, наша теория позволила объяснить ряд парадоксальных результатов, предсказанных в рамках классических теорий.

Например, статистико-термодинамическая теория плавления полимеров Флори [3] даёт температуру плавления полиэтилена при атмосферном давлении около 2400 К, хотя известно, что температура плавления полиэтилена составляет 410–420 К. Разработанная нами теория объясняет причину столь большого расхождения теории и эксперимента. Дело в том, что выражения для температуры плавления в теории Флори получены в предположении о неизменности объёма при плавлении, что согласно уравнению Клапейрона-Клаузиуса соответствует точке максимума на зависимости  $T_m = f(P)$ . По экспериментальным данным [4] температура плавления полиэтилена при 35 катм достигла примерно 700 К. Рост температуры плавления при этом давлении замедлился, и из хода кривой плавления можно ожидать, что температура в максимуме равна 1000–1200 К, много меньше температуры плавления, рассчитанной по теории Флори. Согласно нашей теории, асимптотическая температура плавления полимеров при очень высоких давлениях равна  $T_m^\infty = \Delta\varepsilon / (k_B \ln((z-2)/((z'/(z'-2))^{(z'-2)/2} - 1)))$ , где  $\Delta\varepsilon$  – термодинамическая гибкость цепи,  $z$  – валентность скелетных атомов,  $z'$  – координационное число решетки. Из этого соотношения при  $\Delta\varepsilon = 800$  кал/моль,  $z = 4$  и  $z' = 6$  получим  $T_m = 858$  К, а при  $z' = 8$  получим  $T_m = 1064$  К. Эти значения хорошо согласуются с оценкой температуры максимума на кривой плавления полиэтилена.

Итак, с учетом имеющихся апробированных теорий стеклования и совместимости, появляется возможность на основе единой статистико-термодинамической теории предсказывать также и плавление полимеров под давлением.

- [1] В.Ф. Скородумов. *Физико-химия полимеров*. Сб. научных трудов. Тверской гос. ун-т. Тверь, 1999, 40-47
- [2]. В.Ф. Скородумов. *Физико-химия полимеров*. Сб. научных трудов. Тверской гос. ун-т. Тверь, 1999, 48-51
- [3]. P.J. Flory. *Proc. Roy. Soc. (London)* **A234** (1956) 63
- [4]. C. Karunakaran, S.N. Vaidya. *Mat. Res. Bull.* **19** (1984) 607

# **АТОМНЫЕ КОЛЕБАНИЯ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ**

В.А.Соменков

*РНИЦ «Курчатовский институт», Москва*

На основе исследований упругого и неупругого рассеяния нейтронов при высоких давлениях и температурах рассмотрены различные типы фазовых переходов, происходящие в простых системах при изменении внешних условий: переходы с изменением размерности, ориентационные переходы, полиморфные превращения в металлах. Показана существенная роль ангармонизма, анизотропии и взаимодействия между возбуждениями и локальных колебаний в фазовых переходах. Обсуждаются также проблемы стабильности неупорядоченных и аморфных систем.

Работа поддержана грантами РФФИ: № 03-02-17387, №04-02-16881 и программой «Нейтронные исследования конденсированных сред».

## ФОРМИРОВАНИЕ АЛМАЗА В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ КАРБОНАТ–УГЛЕРОДНЫХ СРЕДАХ: ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ, КИНЕТИКА, ПРИМЕСНЫЙ АЗОТ

А.В. Спивак<sup>1,2</sup>, С.Н. Шиловарева<sup>3</sup>, Ю.А. Литвин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка*

<sup>2</sup>*Московский государственный университет, Москва*

<sup>3</sup>*Институт геохимии и аналитической химии РАН, Москва*

Минералогические эксперименты при высоких давлениях [1,2] с учетом данных химической минералогии [3] позволили воспроизвести процессы кристаллизации природных алмазов в опытах с расплавами карбонат–углеродных систем.

В данной работе многокомпонентный карбонат–углеродный расплав–раствор системы  $K_2CO_3-Na_2CO_3-CaCO_3-MgCO_3-FeCO_3-C$  впервые использован для кристаллизации алмаза. По данным химической минералогии компоненты этой системы входят в составы природных алмазообразующих сред, и мы установили, что алмаз эффективно кристаллизуется в расплавах системы при давлениях 5.5–8.5 ГПа. Пересыщенные к алмазу растворы углерода формируются в карбонат–углеродных расплавах благодаря двум факторам: (1) разнице растворимостей исходного графита (термодинамически нестабильной фазы в поле алмаза) и алмаза и (2) градиенту температуры. Нами определены граничные  $PT$  условия спонтанной кристаллизации алмаза из лабильно пересыщенных к алмазу многокомпонентных расплавов–растворов и условия роста на алмазных подложках из метастабильно пересыщенных к алмазу тех же расплавов–растворов. Характерной особенностью кристаллизации алмаза в многокомпонентных карбонатных системах является интенсивная спонтанная кристаллизация вблизи границы алмаз–графит. Другой особенностью карбонат–углеродной системы являются процессы перекристаллизации исходного поликристаллического графита в графитовые монокристаллы – блоки, пластины и сферулы – в метастабильно пересыщенных к алмазу расплавах–растворах углерода. Скорость и плотность спонтанной нуклеации существенны, соответственно, около  $100 \mu\text{m}/\text{мин}$  и не менее  $1-2 \cdot 10^3$  центров кристаллизации/ $\text{мм}^3$ ; они зависят от  $PT$  параметров. Кристаллы алмазов в карбонат–углеродных расплавах–растворах растут исключительно в форме октаэдрических пирамид; характерны шпинелевые двойники, встречается полисинтетическое двойникование. Наивысшая плотность нуклеации ( $5-10 \cdot 10^4$  зародышей/ $\text{мм}^3$ ) и лавинная скорость кристаллизации достигнуты при синтезе поликристаллов – аналогов природных алмазитов [4].

При изучении физических свойств новых «карбонат–синтетических» алмазов использованы методы ИК и рамановской спектроскопии, ЭПР, катодоллюминесценции и др. Для определения содержания азота и исследования его распределения в приповерхностной области и в объеме кристаллов алмаза впервые применён метод ядерного зонда (CEA-CNRS, Saclay, France).

*Поддержка: РФФИ (гранты 02-05-64684), ведущие научные школы (грант НШ-1955.2003.5).*

[1] Ю.А. Литвин, В.А. Жариков. *Докл. АН* **373**(5) (2000) 867

[2] A.V. Spivak, Yu.A. Litvin. *Diamond and Related Materials* **13**(3) (1994) 482

[3] M. Schrauder, O. Navon. *Geochim. Cosmochim. Acta* **58**(2) (1994) 761

[4] Ю.А. Литвин, А.В. Спивак. *Докл. АН* **391**(5) (2003) 673

# ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ПЕРЕГРЕТЫХ КРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

В.В. Стегайлов

*Институт теплофизики экстремальных состояний РАН, Москва*

Природа фазовых превращений первого рода допускает существование метастабильных состояний, в которых структура одной из фаз сохраняется конечное время в квазиравновесном состоянии до перехода в термодинамически более устойчивую фазу. К настоящему времени одним из недостаточно изученных состояний такого рода является перегретая твердая кристаллическая фаза. В данной работе представлены результаты изучения ряда свойств кристаллической фазы в перегретом состоянии методом молекулярной динамики.

Метод молекулярной динамики состоит в численном интегрировании классических уравнений движения многоатомной системы при заданном потенциале межчастичного взаимодействия. Получаемая в результате детальная информация о динамике частиц позволяет рассчитывать и анализировать термодинамические, кинетические и структурные свойства рассматриваемой системы. В данной работе приводятся результаты расчетов с модельными парными потенциалами мягкого отталкивания и Леннарда–Джонса, а также с многочастичным потенциалом погруженного атома для меди. Число атомов, используемое в расчетах  $10^3$ – $10^5$ . Для исключения влияния размерных эффектов на расчетную ячейку накладываются периодические граничные условия.

В данной работе исследуется самопроизвольный распад ГЦК кристалла, перегретого до температуры выше температуры плавления. Предложен метод расчета времени жизни перегретого кристалла, основанный на статистическом усреднении по ансамблю траекторий [1,2]. Проанализировано изменение структуры в процессе гомогенной нуклеации расплава. Получена температурная зависимость частоты гомогенной нуклеации. На основе кинетического критерия устойчивости проведена оценка положения спинодали.

Исследован распад кристалла при изохорическом нагреве с постоянной скоростью. Получена зависимость температуры распада от степени перегрева. Показано, что полученные результаты соответствуют вероятностной модели зародышеобразования.

Проведено моделирование процесса гетерогенного плавления с открытой поверхностью. Проанализирована структура фронта плавления и получена зависимость скорости распространения фронта от величины перегрева.

Работа выполнена при поддержке РФФИ по гранту №04-02-17065-а.

[1] Г.Э. Норман, В.В. Стегайлов, *ДАН* **376** (2002) 328

[2] G.E. Norman, V.V. Stegailov, *Molecular Simulation* (2004) в печати.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В ЦИРКОНИИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Е.Б. Долгушева, В.Ю. Трубицын, Е.И. Саламатов

*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск*

Развитие методов расчета электронных и фононных состояний, основанных на теории функционала электронной плотности позволило проводить теоретическое изучение разнообразных свойств кристаллических твердых тел из первых принципов. Одним из наиболее важных и интенсивно развивающихся приложений таких расчетов является изучение структурной стабильности и фазовых переходов под действием высоких давлений и температур.

Разработанные на сегодняшний день методы построения  $P$ – $T$  фазовых диаграмм позволяют получить качественное и количественное согласие с экспериментальными данными. Однако в ряде случаев задача определения фазовой диаграммы полностью из первых принципов не может быть решена. Такая ситуация, например, возникает в цирконии. Связано это с тем, что при высоких температурах в  $Zr$  наблюдается сильная зависимость частоты некоторых колебательных мод от температуры, а учет ангармонических вкладов в колебательную энергию все еще остается серьезной проблемой. Другим недостатком первопринципных методов является практическая невозможность *предсказать* существование той или иной структуры при определенных значениях давления и температуры. В особенности это относится к кристаллам со сложной кристаллической структурой или сильно неоднородным по составу фазам. Одним из наиболее перспективных методов, лишенный указанных недостатков при изучении фазовых диаграмм является метод молекулярной динамики.

В данной работе нами проведен анализ динамики структурных фазовых переходов в цирконии в широком интервале температур и давлений с помощью молекулярно-динамического моделирования. Для описания межатомного взаимодействия использовали псевдопотенциал Анималу для переходных металлов с обменнокорреляционной функцией Шоу. При подгонке параметров псевдопотенциала использовали экспериментально наблюдаемые значение равновесного объема и фононные спектры  $\alpha$ -циркония. Построенная в результате моделирования  $P$ – $T$  фазовая диаграмма  $Zr$  качественно согласуется с экспериментальной.

Подробно изучена кинетика переходов между  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\omega$  фазами при различных значениях температуры и давления. Результаты моделирования показывают, что использование парного потенциала позволяет достаточно хорошо описать динамику перехода между  $\alpha$ - и  $\beta$ -фазами. Однако наклон линии раздела этих фаз значительно больше экспериментального. Возможно, это связано с необходимостью учета электронной энтропии, которая в нашем расчете не учитывалась. Дополнительно обсуждается возможность молекулярно динамического моделирования  $\omega$ -циркония в рамках парного потенциала.

## **СЖАТИЕ ВЕЩЕСТВ СВЕРХВЫСОКИМИ ДАВЛЕНИЯМИ УДАРНЫХ ВОЛН**

Р.Ф. Трунин

*Всероссийский Научно-исследовательский Институт Экспериментальной Физики,  
Российский Федеральный Ядерный Центр – РФЯЦ – ВНИИЭФ*

Рассматриваются способы создания и измерения давлений в исследуемых образцах, начиная с так называемых “контактных” измерительных устройств, где в качестве энергетического источника давлений используются мощные взрывчатые составы, и заканчивая подземными взрывами с термоядерными “энергетическими установками”. При этом диапазон исследуемых давлений для элементов, отвечающих средним атомным номерам, составил от долей до 2000 ГПа.

В настоящее время у нас исследовано около 300 веществ различных классов, в том числе практически все элементы периодической системы, большое число металлических соединений, жидкие и твёрдые органические вещества, инертные газы.

Важность исследования ударно-волновых свойств этих веществ определяется, прежде всего, необходимостью нахождения так называемых уравнений состояния (УРС), связывающих функциональной зависимостью энергию (температуру), давление и плотность. Эти уравнения, базирующиеся на данных по ударной сжимаемости веществ, необходимы, в свою очередь, для замыкания системы уравнений сплошной среды, используемых при математических расчётах создаваемых конструкций и установок (и не только для создания новых типов ядерных зарядов!).

Анализируются данные по сжимаемости различных металлов. Сопоставляются результаты, полученные российскими исследователями с данными зарубежных учёных.

В заключение даётся информация о вышедшем в РФЯЦ большом Справочнике по ударно-волновому сжатию различных веществ и подготавливаемому сейчас к изданию нового, существенно расширенного варианта этого справочника.

# ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМОРФИЗМА В НИОБАТАХ И ТАНТАЛАТАХ 3d-ПЕРЕХОДНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И ТЕМПЕРАТУР

А.П. Тютюнник<sup>1</sup>, Н.В. Таракина<sup>1</sup>, В.Г. Зубков<sup>1</sup>, Т.В. Дьячкова<sup>1</sup>, Ю.Г. Зайнулин<sup>1</sup>,  
Г. Свенссон<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>Стокгольмский университет, Стокгольм

Целью этой работы является решение вопросов, связанных с синтезом, определением кристаллической структуры и изучением природы химической связи в новых полиморфных модификациях оксониобатов и оксотанталатов 3d-переходных элементов. В рамках этого исследования проведено детальное изучение кристаллической структуры новой фазы высокого давления  $\text{MnTa}_2\text{O}_6$ , приготовленной при  $T=1400^\circ\text{C}$ ,  $P=8$  ГПа из смеси  $\text{MnO}$  и  $\text{Ta}_2\text{O}_5$ . С использованием данных рентгеновской порошковой и электронной дифракций установлено, что эта модификация имеет модулированную структуру типа  $\alpha\text{-PbO}_2$  (пр.гр.  $Pbcn$ ,  $Z=4$ ). Она может быть описана только с применением дополнительного вектора трансляции в четырехмерной пространственной группе  $P:P1121/n(\alpha, \beta, 0)$ . Параметры решетки новой модификации  $\text{MnTa}_2\text{O}_6$  равны  $a=4.7472(2)$  Å,  $b=5.7453(3)$  Å,  $c=5.1496(3)$  Å,  $\gamma=90.023(9)^\circ$  и вектор модуляции  $q=-0.1038(4)\times a^* + 0.6910(7)\times b^*$ . Показано, что в системе  $\text{ZnO-Ta}_2\text{O}_5$  существует новая модификация состава  $\text{Zn}_4\text{Ta}_2\text{O}_9$ , отличная от ранее опубликованной моноклинной [M. Waburg, Hk. Muller-Buschbaum, *Z. Anorg. allg. Chem.* **522** (1985) 137]. Кристаллическая структура этой новой модификации является тригональной с параметрами элементарной ячейки:  $a=5.2061$  Å,  $c=14.0665$  Å. Однако детальный анализ картины электронной дифракции показал, что вдоль оси  $c$  наблюдается статистическое нарушение чередования слоев, присущих тригональной и ромбоэдрической модификациям. Была впервые получена новая модификация фазы  $\text{Zn}_3\text{Ta}_2\text{O}_8$ , со структурой  $\text{Zn}_3\text{Nb}_2\text{O}_8$ . При изучении фазообразования в системе  $\text{FeO-Ta}_2\text{O}_5$  в условиях высоких давлений и температур было обнаружено формирование как минимум трех новых фаз. Так, при энергодисперсионном анализе продуктов термобарической обработки исходной смеси брутто-состава “ $\text{Fe}_4\text{Ta}_2\text{O}_9$ ” при  $T=1500\text{--}1700^\circ\text{C}$  и  $P=9$  ГПа были обнаружены:  $\text{Fe}_4\text{Ta}_2\text{O}_9$  (изоструктурная полученной нами в ходе выполнения этого проекта ромбоэдрической модификации фазы  $\text{Mn}_4\text{Nb}_2\text{O}_9$ ) и новые фазы примерного состава  $\text{Fe}_{11}\text{Ta}_4\text{O}_{21}$  и  $\text{Fe}_2\text{Ta}_2\text{O}_7$ .

Работа выполнена в рамках грантов: РФФИ № 02-03-32403а, гранта поддержки научных школ № НШ-1046.2003.3 и при поддержке Swedish Natural Science Research Council.



## ВЫСОКОБАРИЧЕСКИЕ МИНЕРАЛЬНЫЕ ФАЗЫ, ОБРАЗУЮЩИЕСЯ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ ГРАНАТА

Е.А. Козлов<sup>1</sup>, В.И. Фельдман<sup>2</sup>, Л.В. Сазонова<sup>2</sup>, Е.В. Сизова<sup>2</sup>, И.В. Белятинская<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский НИИ технической физики  
им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Челябинской области*

<sup>2</sup>*Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, геологический  
факультет, кафедра петрологии, Москва*

1. Ударно-волновое нагружение граната производилось сферической сходящейся ударной волной по методике ВНИИТФ (г. Снежинск). Проба готовилась в виде шаров диаметром около 50 мм. Нагружение менялось от 20 ГПа на поверхности до 350 ГПа в 1 мм от его центра. После сферического обжатия, разгрузки и остывания образцы распиливались в меридиональной плоскости, полировались и изучались на растровом электронном микроскопе CamScan 4DV с энергодисперсионным анализатором Link AN-10000.

2. Состав исходного граната существенно альмандин-пироповый (до 40 – 60 % альмандиновой составляющей).

3. В интервале 25–72 ГПа гранат превращался в агрегат, сложенный шпинелидом (шпинель – герцинитового состава) и фазами, состав которых отвечает глиноземистому рингвудиту, глиноземистому меджориту, меджоритовому гранату и акимотоиту. В интерстициях агрегат местами содержит стекло. Размеры зерен перечисленных минералов лежат в пределах 1–30 мкм.

4. При более низких давлениях агрегат формируется в тонких (около 1–10 мкм) трещинах, беспорядочно рассекающих зерна граната. При более высоких (выше 30 ГПа) напряжениях гранат полностью замещается этим агрегатом; при этом форма и размеры исходного зерна граната полностью сохраняются.

5. Высокобарические фазы по гранату при ударно-волновом нагружении получены впервые.

Изучение результатов эксперимента проводилось при поддержке гранта РФФИ 03-05-64496.

## PROPERTIES OF NOVEL HYDRIDES SYNTHESIZED UNDER HIGH HYDROGEN PRESSURES FROM C15 LAVES PHASES

S.M. Filipek<sup>1</sup>, V. Paul-Boncour<sup>2</sup>, H. Sugiura<sup>3</sup>, R.S. Liu<sup>4</sup> and I. Marchuk<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Phys. Chem., Polish Academy of Sci., 01-224 Warsaw, Poland*

<sup>2</sup>*1- LCMTR, CNRS, 2-8 rue H. Dunant, 94320 Thiais, France*

<sup>3</sup>*Graduate School of Integrated Sci., Yokohama City University, 22-2 Seto, Kanazawa-ku, Yokohama 236-0027, Japan*

<sup>4</sup>*Department of Chemistry, National Taiwan University, Taipei 106, Taiwan, R.O.C.*

Parent materials ZrFe<sub>2</sub>, ZrCo<sub>2</sub>, YFe<sub>2</sub>, ErFe<sub>2</sub> and YMn<sub>2</sub> were synthesized by induction melting of pure elements followed by an annealing under vacuum. All samples were homogenous with single-phase C15 cubic structure. Samples were placed in a conventional piston–cylinder apparatus and exposed to hydrogen pressure up to 1.5 GPa and temperature up to 150<sup>0</sup>C. The XRD patterns were measured with a D8 Brucker diffractometer using CuK $\alpha$  radiation.

For ZrFe<sub>2</sub> and ZrCo<sub>2</sub> the parent C15 cubic symmetry remained, but a remarkable increase of lattice parameter has been observed (by 23 % for ZrFe<sub>2</sub>D<sub>3</sub> and by 12 % for ZrCo<sub>2</sub>D<sub>2</sub>). The parent C15 transformed into orthorhombic (*Imm2*) structure for ErFe<sub>2</sub>D<sub>5</sub> and YFe<sub>2</sub>D<sub>5</sub>. Formation of YFe<sub>2</sub>H<sub>5</sub> resulted, like in ErFe<sub>2</sub>H<sub>5</sub> with a strong reduction of magnetic moment associated with iron. A very interesting case is the YMn<sub>2</sub> which under 0.2 GPa of hydrogen pressure forms YMn<sub>2</sub>H<sub>6</sub> dramatically changing its crystalline structure from C15 cubic to *F-43m* cubic with lattice parameter  $a = 6.709 \text{ \AA}$ .

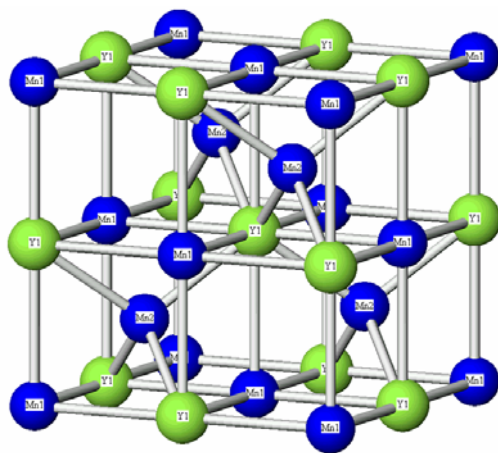


Fig.5. The crystal structure of YMn<sub>2</sub>H<sub>6</sub> with cubic unit cell (*F-43m*)

The EOS for some of these Laves based hydrides were determined and their pressure-induced behavior is characterized.

## НОВЫЕ ГИДРАТЫ ТАНТАЛА: КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПРИ 5.0 ГПа

В.П. Филоненко<sup>1</sup>, И.П. Зибров<sup>2</sup>, С.В. Гармаш<sup>2</sup>, Д.В. Дробот<sup>3</sup>, Е.Е. Никишина<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт физики высоких давлений РАН, Троицк,

<sup>2</sup> Институт кристаллографии РАН, Москва,

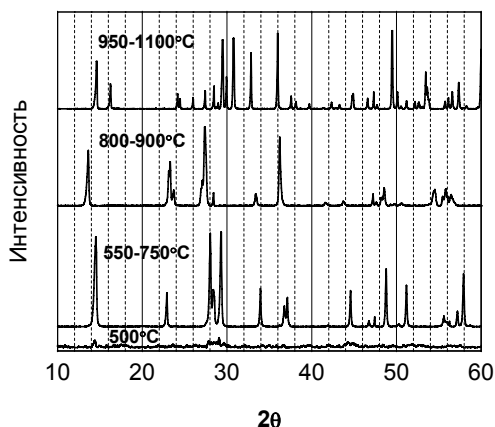
<sup>3</sup> Московская Государственная академия тонкой химической технологии, Москва

В отличие от пентаоксида тантала, насчитывающего к настоящему времени по крайней мере семь модификаций, известно только два его гидроксида(гидрата):  $\text{HTaO}_3$  и  $\text{H}_2\text{Ta}_2\text{O}_6 \cdot \text{H}_2\text{O}$ . Первая фаза является кубической с параметром ячейки  $a \approx 7.6 \text{ \AA}$  [1], а вторая фаза имеет структуру пирохлора ( $a = 10.6 \text{ \AA}$ ) [2].

Исходным материалом для исследования служил маловодный (18–20 мас.% воды) аморфный гидроксид тантала. При нормальном давлении он теряет всю воду ниже температуры кристаллизации ( $\sim 710^\circ\text{C}$ ), когда образуется известная фаза ТТ(L)- $\text{Ta}_2\text{O}_5$  [3]. Но при давлениях выше 5.0 ГПа вода остается вплоть до кристаллизации, что приводит к формированию новых гидроксидных (гидратных) фаз. Работа проведена в камере типа тороид с образцами  $\varnothing 5 \times h 3$  мм. Свойства и термостабильность новых фаз изучены методами рентгенографии, ИК спектроскопии и термического анализа.

Установлено, что при  $T = 550\text{--}750^\circ\text{C}$  и  $P = 5.0\text{--}5.5$  ГПа всегда образуется смесь двух известных фаз: ТТ- $\text{Ta}_2\text{O}_5$  и  $\text{H}_2\text{Ta}_2\text{O}_6 \cdot x\text{H}_2\text{O}$ . При средних температурах ( $800\text{--}900^\circ\text{C}$ ) кристаллизуется гидрат со структурой гексагональной вольфрамовой бронзы (НТВ), а при более высоких ( $950\text{--}1100^\circ\text{C}$ ) формируется еще один новый гидрат, F- $\text{Ta}_2\text{O}_5 \cdot 2/3\text{H}_2\text{O}$ . Во всех трех структурах имеются достаточно большие каналы, в которых могут располагаться молекулы воды. Структуры пирохлора и НТВ строятся из октаэдров ( $\text{TaO}_6$ ), а структура F фазы состоит из пентагональных бипирамид и восьмивершинников [4]. Следует отметить, что стехиометрия каркаса НТВ соответствует формуле  $\text{MeO}_3$ , а высокотемпературного гидрата – формуле  $\text{Me}_3\text{O}_8$ . Уточнение структуры методом Ритвельда по рентгеновским данным позволило установить механизмы реализации необходимой стехиометрии  $\text{Me}_2\text{O}_5$ .

Изучена температурная устойчивость новых фаз при нормальном давлении. Проведен сравнительный анализ количества воды в структурах и кинетики ее удаления при нагреве. Показано, что полностью удалить воду без разрушения базовой структуры удается только для высокотемпературного гидрата F- $\text{Ta}_2\text{O}_5 \cdot 2/3\text{H}_2\text{O}$ .



Дифрактограммы образцов после термобарической обработки

[1] M.T. Weller, P.G. Dickens. *J. Sol. State Chem.* **58** (1985) 164

[2] D. Groult., J. Pannetier., B. Raveau. *J. Sol. State Chem.* **41** (1982) 277

[3] Е.Е. Никишина, Д.В. Дробот, В.П. Филоненко, И.П. Зибров. *ЖНХ*, **47**(1) (2002) 14

[4] И.П. Зибров, В.П. Филоненко, Д.В. Дробот, Е.Е. Никишина. *ЖНХ*, **48**(4) (2003) 543

## LIQUID- AND CRYSTAL-LIKE STRUCTURES IN DUSTY PLASMAS

*Vladimir E. Fortov*

*Institute for High Energy Densities, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*

The dusty plasma is a partly ionized gas that, in the majority of cases, contains negatively charged dust particles of micron size. Micron-sized dust particles in the dusty plasma assume a significant negative charge ( $\sim 10^3$ - $10^5 e$ ) and may form quasi-stationary plasma-dust structures similar to a liquid or a solid. In contrast to real liquids, the laboratory dusty plasma is a good experimental model for studying the properties of non-ideal systems, because, owing to their size, dust particles may be videofilmed, which significantly simplifies the use of direct methods for their diagnostics. Experimental studies of dusty plasma may play an important part in verifying the existing, and developing new, phenomenological models for strongly coupled liquid systems.

Results are presented for a set of experiments performed in gas-discharge plasma under ground bounded and microgravity conditions. The results of investigation of structural properties (pair correlation function and three-particles correlation) and dynamical processes such as diffusion, formation of dust vortices in the strongly non-ideal dusty plasma are considered.

Results are given of experimental investigation of three-particle correlation for liquid plasma-dust structures formed in the electrode layer of a capacitive RF discharge. The obtained three-particle correlation functions for experimental and numerical data are analyzed and compared with the superposition approximation. The forming of clusters of macroparticles in plasma-dust systems being analyzed is revealed.

The radial distribution functions of quasiliquid dusty plasma in RF-discharge have been obtained from videotape recordings of experimental object. With the help of special procedure the parameters of Debye potential between dust particles have been estimated. The calculations of radial distribution functions of dusty plasma with Debye potential with these parameters have been made using hypernetted chain integral equation. The results are in a good agreement with experiment at low coupling parameters.

The dynamics of dust vortices was analyzed experimentally. An empirical approximation was obtained for the radial distribution of angular velocities of macroparticles. It was shown that, in the presence of a considerable ion drag force, a slight variation of the charge of macroparticles is sufficient for the formation of their vortex motion. The experimental investigations of rotation of dust particles are of considerable interest for the development of appropriate theoretical models for describing vortices in strongly non-ideal dissipative systems.

The dusty plasma viscosity is one of main characteristics of the plasma medium under study. Attempts at theoretical calculation of shear viscosity run into the need of using a not quite well-defined approximation of interparticle interaction by the Debye potential. Therefore, it is of significant interest to experimentally estimate the dust plasma viscosity. Results of experimental investigation of the viscosity of a dust-plasma liquid were obtained. A uniform flow of a jet of a dust-plasma liquid was experimentally realized, and the results of analysis of the obtained data made it possible to estimate the coefficient of dynamic viscosity of a dust-plasma liquid.

**ИЗУЧЕНИЕ РАССЕЯНИЯ УДАРНЫХ ВОЛН НА  
МИКРОНЕОДНОРОДНОСТЯХ СРЕДЫ НА ОСНОВЕ АНАЛИЗА  
МИКРОСКОПИЧЕСКИХ ОСОБЕННОСТЕЙ ОСТАТОЧНОЙ ДЕФОРМАЦИИ  
НАГРУЖЕННЫХ ОБРАЗЦОВ**

А.Э. Хейфец<sup>1</sup>, В.И. Зельдович<sup>1</sup>, Н.Ю. Фролова<sup>1</sup>, Б.В. Литвинов<sup>2</sup>, Н.П. Пурыгин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*

<sup>2</sup>*Российский Федеральный Ядерный Центр, ВНИИТФ, Снежинск*

Взаимодействие ударных волн с микроскопически неоднородной средой исследовалось на примере перлитной составляющей стали 40Х с содержанием 0.4 вес. % углерода и 1.1 вес. % хрома. Перлитная составляющая стали в исходном состоянии (до нагружения) представляла собой совокупность областей чередующихся пластин цементита и феррита. Среднее расстояние между пластинами цементита составляло ~150 нм. Величина давления в ударной волне была около 75 ГПа.

Под действием ударной волны материал стали претерпевал микроскопически неоднородную пластическую деформацию. Пластины цементита дробились, причем направления смещений отдельных осколков легко прослеживалось на электронно-микроскопических снимках при увеличении  $\times 30000$  и более. Это позволило рассматривать перлитную составляющую стали как естественную реперную сетку, по искажениям которой можно изучать микроскопические особенности деформации. Целью исследования было выяснить, является ли наличие обнаруженных микрофлуктуаций деформации проявлением малоизученной тонкой структуры ударно-волнового фронта, или же неоднородность среды приводит к формированию таких микрофлуктуаций. Анализ микроскопических особенностей деформации перлита позволил установить направление вектора наибольших касательных напряжений и определить ориентацию ударно-волнового фронта относительно полученной локальным методом микроструктуры. Показано, что в зависимости от ориентации перлитной колонии относительно фронта поглощение энергии ударной волны веществом образца происходит по-разному: в случае расположения пластин цементита параллельно направлению вектора наибольших касательных напряжений энергия расходуется на разогрев и сфероидизацию карбидов, в иных случаях происходит хрупкое разрушение цементита. Оцифровка электронно-микроскопических данных с последующей математической обработкой позволили получить следующие результаты. Установлено, что смещения осколков пластин цементита скоррелированы на расстояниях в пределах 150 нм – в этой точке наблюдается резкий спад функции корреляции почти до нулевого значения. Характерный размер области корреляции практически совпадает с характерным размером исходной неоднородности перлитной структуры (межпластиночным расстоянием). Данное совпадение в совокупности с проведенными оценками характерных размеров флуктуаций течения за фронтом ударной волны позволяет сделать вывод о том, что физическая природа наблюдаемых микроскопических неоднородностей деформации связана с рассеянием ударных волн на микронеоднородностях среды (цементитных пластинах). Присутствующие в материале неоднородности приводят к формированию тонкой структуры ударно-волнового воздействия, "отпечаток" которой проявляется в нагружаемом веществе в виде микроскопически локализованной деформации.

Работа выполнена по программе Президиума РАН “Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий” и при поддержке проекта НШ-778.2003.3.

## СИНТЕЗ ДИБОРИДОВ RВ<sub>2</sub> ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ. МАГНЕТИЗМ YbB<sub>2</sub>

А.В. Цвященко<sup>1</sup>, Л.Н. Фомичева<sup>1</sup>, М.А. Авила<sup>2</sup>, С.Л. Будько<sup>2</sup>, Р.А. Рибейро<sup>2</sup>,  
П.К. Кенфилд<sup>2</sup>, К. Петровик<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк*

<sup>2</sup>*Эймская Лаборатория, Эймс*

<sup>3</sup>*Брукхевенская Национальная Лаборатория, Уpton*

В работе при давлении 6.2 ГПа из исходных компонентов был синтезирован ряд соединений RB<sub>2</sub>. Соединения LaB<sub>2</sub> и CeB<sub>2</sub> не были получены вплоть до давления 8.0 ГПа. Соединение SmB<sub>2</sub> образуется при давлении выше 3.0 ГПа.

Особое внимание в работе было уделено изучению свойств YbB<sub>2</sub>, так как параметры решетки указывали на трехвалентное поведение ионов иттербия в соединении. Поэтому были проведены измерения температурной и полевой зависимости магнитной восприимчивости, удельной теплоемкости, сопротивления и магнетосопротивления образцов YbB<sub>2</sub>, приготовленных двумя разными способами, используя различные температуры, давления и времена выдержки. Оказалось, что поведение образцов сильно зависит от способа их приготовления из-за присутствия различных побочных фаз, большинство из которых на дифрактограммах мы идентифицировали. Эти эксперименты показали, что соединение YbB<sub>2</sub> является металлом с атомами Yb, находящимися в трехвалентном состоянии (Yb<sup>3+</sup>), или в состоянии очень близким к этому. Оказывается, что в YbB<sub>2</sub> ниже температуры 5.7 К появляется антиферромагнитный порядок. Эту температуру можно рассматривать как относительно высокую температуру упорядочения для магнитного соединения, образованного иттербием. Мы получили также показания эффекта кристаллического электрического поля (CEF) и увеличенную электронную массу на уровне Ферми.

Работа поддержана РФФИ, грант № 04-02-16061.

# ФЛЮИДНЫЕ СИСТЕМЫ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ И ТЕМПЕРАТУРАХ

К.И. Шмулович

*Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка.*

Природный флюид имеет сложный состав, главными компонентами которого являются  $H_2O$ , неполярные газы типа  $CO_2$  и  $N_2$ , а также соли  $NaCl$ ,  $CaCl_2$  и т.п. Примесь силикатной составляющей невелика, порядка первых процентов и менее. Граничные условия существования флюида определяются критическими явлениями в системах МИНЕРАЛ +  $H_2O$  (Bureau, Kerpler, EPSL, 1999) и реализуются вблизи границы корамантия. Свойства флюида хорошо изучены лишь в условиях верхней коры (т.е. до 0.5 ГПа и  $1000^\circ C$ ), нижняя и средняя кора недоступны прямым наблюдениям (в частности, не удалось получить представительные керны с 10 км Кольской сверхглубокой), а изучаются геофизическими методами. Породы коры можно разделить на две главные геохимические группы – задающие флюидный состав с преимущественно моновалентными катионами (кварц–полевошпатовые породы) и двухвалентными (базальты и карбонаты). На флюидонасыщенных литологических границах в нижней коре происходит перераспределение компонентов, приводящее к нетривиальным геофизическим сигналам.

1. В трехкомпонентных системах  $H_2O-CO_2-Соль$  даже при  $900^\circ C$  и 1 ГПа наблюдается широкое поле несмесимости (т.е. две флюидные фазы), причем это поле значительно шире в системах с двухвалентными катионами, чем с моновалентными. Диффузионный профиль по катионам окрест литологической границы приводит к псевдокритическим явлениям и метастабильности флюида, пересыщенного относительно второй флюидной фазы. Поглощение акустической энергии при нуклеации второй флюидной фазы будет усиливать сейсмическое отражение от такой границы даже при малой разности плотностей пород (Shmulovich, Graham, CMP, 2004).
2. Растворимость кремнезема ( $SiO_2$ ) во флюидных системах с моновалентными катионами в несколько раз больше, чем в системах с двухвалентными катионами. Различие в растворимостях кремнезема приводит к формированию зон повышенной пористости и, соответственно, повышенной электропроводности *вдоль* литологических границ.
3. Соотношение одно- и двухвалентных катионов во флюиде задается обменными равновесиями типа ПОЛЕВОЙ ШПАТ  $\leftrightarrow$  РАСТВОР (например,  $2Albite + CaCl_2 = Anortite + 2NaCl + 4 Quartz$ ). Экспериментальное исследование таких равновесий показало, что простые процессы гидратации (дегидратации) приводят к значительным сдвигам в составе плагиоклазов, имитируя изменение химических потенциалов щелочных и щелочноземельных катионов. При 0.5 ГПа и  $700^\circ C$  в интервале концентраций от типичного раствора (1 m  $NaCl + CaCl_2$ ) до солевых расплавов (64 m) концентрации моновалентных катионов превышают концентрации двухвалентных.
4. Не вполне понятны пока размерные эффекты в приложении к флюидной фазе нижней коры, где термодинамика флюида зависит от взаимодействия с минеральной матрицей.

## **IN SITU STUDY OF LIQUID Fe AND LIQUID Fe-ALLOYS UNDER HIGH PRESSURES**

C. Sanloup<sup>1</sup>, G. Morard<sup>2,4</sup>, G. Fiquet<sup>2</sup>, E. Gregoryanz<sup>3</sup>, M. Mezouar<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Laboratoire MAGIE, Université Pierre et Marie Curie, Paris, France*

<sup>2</sup>*LMCP, Université Pierre et Marie Curie, Paris, France*

<sup>3</sup>*Geophysical Laboratory, Carnegie Institution of Washington, Washington DC, USA*

<sup>4</sup>*European Synchrotron Radiation Facility, Grenoble, France*

The properties of liquid iron at high pressure are of great current interest because iron is a classic *d*-electron metal, it exhibits extensive polymorphism at high pressures and temperatures, and it is the dominant component of planetary cores. Besides physical properties, the *in situ* study of potential liquid–liquid transitions is a fastly growing experimental field ([1] and refs. therein). Criteria are then based either on the observation of discontinuities in bulk properties (density [2], electrical resistivity [3] for instance) or in modifications of the short-order range structure [4]. X-ray scattering measurements on liquid iron in the vicinity of the  $\delta$ – $\gamma$ –liquid triple point revealed significant changes in the structure of the liquid upon increasing pressure and temperature [5].

Here we report the first direct measurement of the density of liquid iron and Fe–Si alloys at high pressures and temperatures using high-brilliance synchrotron X-ray radiation (ESRF, ID30, Grenoble, France). We used a large volume apparatus that allowed access to the *P–T* range of 0.5–6 GPa and 1500–2400 K while high-energy X-ray absorption and diffraction data were collected *in situ*. In the light of these new results, we can understand the structural changes in liquid iron as a transition from a low pressure/temperature one-domain liquid to a high pressure/temperature two-domain liquid. Geochemical implications will be drawn.

In a second step, we investigate the effect of light elements (S and Si, potentially present in the Earth's core) on the equation of state of liquid Fe. These data confirm our previous prediction of a negligible effect of Si on liquid Fe compressibility, prediction based on the observation of a similar local structure in liquid Fe and liquid Fe–Si alloys [6]. Si and S have therefore opposite effects on P-waves velocity,  $v_P=(K_S/\rho)$ , both elements reduce the bulk density of liquid iron but only S affects its compressibility. Since compression-wave velocities in the Earth's outer core are slightly higher than in pure liquid Fe in the same *P–T* conditions, it implies that Si would correct this discrepancy while S would increase it.

Realistic core compositions are actually ternary or quaternary systems. But at ambient pressure, ternary diagrams of potential liquid core materials show a large gap of miscibility (Fe–S–Si, Fe–FeO and Fe–S–C systems). We will present how the Fe–S–Si ternary diagram evolves with pressure in terms of im/miscibility, in relation with the evolution of the solid phase diagrams.

[1] Y. Katayama and K. Tsuji. *J. Phys.: Condens. Matter* **15** (2003) 6085

[2] Y. Katayama et al. *J. Non-Cryst. Solids* **205/207** (1996) 451

[3] V. Brazhkin et al. *J. Phys.: Condens. Matter* **4** (1992) 1419

[4] Y. Katayama et al. *Nature* **403** (2000) 170

[5] C. Sanloup et al. *Europhys. Lett.* **52** (2000) 151

[6] C. Sanloup et al. *J. Geophys. Res.* **107** (2002) ECV4-1



## ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СОПРОТИВЛЕНИЯ AgGeSbS<sub>3</sub> ПРИ ДАВЛЕНИЯХ 10–45 ГПа

О.Л. Хейфец, А.Н. Бабушкин, И.В. Корионов

*Уральский Государственный Университет, Екатеринбург*

В последние годы в Лаборатории Физики экстремальных воздействий на вещество УрГУ были синтезированы и проведены исследования разнообразных многокомпонентных халькогенидов серебра и меди. Среди исследованных халькогенидов были обнаружены ионные проводники с низкими температурами начала ионного переноса, сегнетоэлектрики и т.д., однако свойства сложных халькогенидов при высоких давлениях практически не изучены.

В настоящей работе были проведены исследования сопротивления AgGeSbS<sub>3</sub> при давлениях 10–45 ГПа в области температур 78 К–400 К. Оригинальная методика синтеза сложных многокомпонентных халькогенидов с использованием современных вакуумных технологий позволяет получать однофазные соединения заданного состава.

Давления создавали с помощью камеры высокого давления (КВД) с алмазными наковальнями типа "закругленный конус – плоскость", изготовленными из синтетических поликристаллических алмазов "карбонадо" [1]. Наковальни хорошо проводят электрический ток и могут быть использованы в качестве электрических контактов к образцу. Сопротивление короткозамкнутых наковален (~10 Ом) слабо меняется с температурой. Погрешность определения давления не превышает 10 % в области давлений 10–50 ГПа. Используемая методика позволяет изучать один и тот же образец при последовательном увеличении и снижении давления, выдерживать длительное время под нагрузкой. Исследованные образцы, полученные сжатием в КВД, имели диаметр ~0,2 мм и толщину 10–30 мкм. Измерения проводили в линейной части вольтамперной характеристики. Напряжение на КВД для исключения электрического пробоя не превышало 10 мВ. Температуру КВД регистрировали термопарой медь–константан.

Соединение AgGeSbS<sub>3</sub> при нормальном давлении является ионным проводником с областью температур начала ионного переноса 150–200 К и долей ионного переноса 99,8 % [2]. При увеличении давления происходит изменение области температур начала ионного переноса ( $T_i$ ), зависимость  $T_i(P)$  носит немонотонный характер. Зависимость сопротивления от температуры также немонотонна. Обнаружен гистерезис сопротивления при нагружении и снятии нагрузки с образца. Определены области существования в образце фазовых переходов, проанализировано изменение энергии активации проводимости с увеличением давления. Исследована временная зависимость сопротивления при разных давлениях.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке CRDF (грант Ek-005-00 [X1]), гранта CRDF и Министерства Образования РФ (BRHE, Post Doctoral Fellowship, award EK-005-X1, annex 7, No Y1-05-09).

1. Л.Ф. Верещагин, Е.Н. Яковлев, Т.Н. Степанов, К.Х. Бибаев, Б.В. Виноградов. *Письма в ЖЭТФ* **16**(4) (1972) 240
2. E.R. Baranova, V.L. Kobelev, O.L. Kobeleva et.al. *Solid State Ionics* **146** (2002) 415

## РЕЛАКСАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ В ДИОКСИДЕ ЦИРКОНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

И.В. Корионов<sup>1</sup>, А.Н. Трефилова<sup>1</sup>, А.Н. Бабушкин<sup>1</sup>,  
W. Lojkowski<sup>2</sup>, A. Opalinska<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский государственный университет им. А.М.Горького, кафедра физики низких температур, г. Екатеринбург

<sup>2</sup>High Pressure Research Center, Polish Academy of Science, ul. Sokolowska 29/37, 01-142 Warsaw, Poland

Физические свойства диоксида циркония составляют научный и, потенциально, технологический интерес, поскольку он может быть использован в датчиках высоких давлений, а также в качестве огнеупорного материала, структурных керамик, высокотемпературных твердых электролитов и оптических материалов.

Общеизвестно, что при обработке высокими давлениями электрические свойства материалов изменяются с течением времени.

Мы представляем результаты исследования релаксационных процессов в  $ZrO_2$  в интервале давлений 35.5–50 ГПа. Измерения были выполнены на нанокристаллических порошках  $ZrO_2$ , стабилизированных Pr (0.5 %), и на компактных порошковых образцах "частично стабилизированного" тетрагонального  $ZrO_2$ , содержащего 5 %  $Y_2O_3$ . Размеры нанокристаллитов составляли 10, 12 и 56 нм [1].

Исследования электрических свойств образцов проводилось на постоянном токе в камере высокого давления с наковальнями типа «закругленный конус–плоскость» на основе синтетических алмазов «карбонадо» [2].

Были обнаружены изменения сопротивления с течением времени для образцов с размерами кристаллитов 10 и 12 нм и для поликристаллического образца, в то время как для образца с размерами кристаллитов 56 нм релаксация не наблюдалась.

Анализ экспериментальных данных показал, что зависимость сопротивления от времени наиболее точно описывается спадающей экспоненциальной функцией для образца с размерами кристаллитов 12 нм (при всех давлениях) и 10 нм (под давлением менее 45.5 ГПа). При давлении свыше 45.5 ГПа сопротивление последнего возрастает со временем. В массивном образце наблюдалось возрастание сопротивления со временем лишь до давления порядка 44 ГПа после чего релаксация исчезала.

Таким образом, анализ приведенных выше эффектов указывает на значительную зависимость характера релаксации электросопротивления от размеров кристаллита в нанокристаллическом состоянии.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов RBRF №01-03-96494 и CRDF № REC-005.

[1] F. Bondioli, A.M. Ferrari, S. Braccini, C. Leonelli, G.C. Pellacani, A. Opalinska, T. Chudoba, E. Grzanka, B. Palosz, W. Lojkowski. *Microwave – Hydrothermal Synthesis of Nanocrystalline Pr - Doped Zirconia Powders at Pressures up to 8 MPa*, 2003

[2] L.F. Vereshchagin, E.N. Yakovlev, G.N. Stepanov et.al. *JETF Lett.* **16** (1972) 3

## ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В $\text{AgGeSbS}_{3x}\text{Se}_{3(1-x)}$ ( $x = 0.4-0.6$ ) ПРИ ДАВЛЕНИЯХ 10–45 ГПа

О.Л. Хейфец-Кобелева<sup>1</sup>, А.Н. Бабушкин<sup>1</sup>, К.Ю. Суханова<sup>1</sup>, Е.С. Флягина<sup>1</sup>, С.Н. Шкерин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Уральский Государственный Университет, Екатеринбург

<sup>2</sup>Институт Высокотемпературной Электрохимии, Екатеринбург

Развитие современной криоэлектроники требует создания новых полупроводниковых материалов с разнообразными физическими свойствами при низких температурах. В Проблемной Лаборатории Физики экстремальных воздействий на вещество (УрГУ) были синтезированы новые сложные халькогениды  $\text{AgGeSbS}_{3x}\text{Se}_{3(1-x)}$  ( $x = 0.3-0.7$ ) и исследованы их электрические свойства.

Настоящая работа посвящена исследованию методом импедансной спектроскопии свойств соединений  $\text{AgGeSbS}_{3x}\text{Se}_{3(1-x)}$  ( $x = 0.4-0.6$ ) при высоких давлениях (10–45 ГПа). Такое исследование представляет большой научный и практический интерес, позволяет уточнить области возможного применения этих соединений приВД.

При нормальном давлении синтезированные халькогениды являются низкотемпературными ионными проводниками. Доля ионной проводимости уменьшается с увеличением доли селена. Соединения имеют серый цвет и металлический блеск. Годографы импеданса при нормальном давлении характеризуется наличием двух четко разделяющихся областей – высокочастотной (процессы в объеме образца) и низкочастотной (электродные процессы).

Для генерации давлений до 45 ГПа использовали камеру высокого давления с наковальнями типа “закруглённый конус – плоскость” из искусственных поликристаллических алмазов “карбонадо”. Электрические свойства образцов исследовались методом импедансной спектроскопии в области частот 10 Гц–800 кГц на установке Solartron FRA 1174. Для описания результатов была предложена схема, в которую были введены элементы, описывающие различные процессы, происходящие в образце (сопротивления, емкости, элемент постоянной фазы).

Были получены годографы импеданса халькогенидов при разных давлениях и исследованы зависимости проводимости от частоты. Исследован гистерезис проводимости при постепенном снятии нагрузки с образца. Было проанализировано влияние границы электрод/образец при различных давлениях. Из барических зависимостей сопротивления на постоянном и переменном токе и тангенса угла диэлектрических потерь получены области существования фазовых переходов в образцах.

По предварительным данным, в  $\text{AgGeSbS}_{1.2}\text{Se}_{1.8}$  существует необратимый фазовый переход в области давлений 23–25 ГПа, в  $\text{AgGeSbS}_{1.5}\text{Se}_{1.5}$  обнаружен фазовый переход при 39–41 ГПа и, возможно, существует переход в области давлений 27–29 ГПа, а в  $\text{AgGeSbS}_{1.8}\text{Se}_{1.2}$  фазовых переходов нет.

После снятия нагрузки с образца при наблюдении под оптическим микроскопом наблюдается изменение его внешнего вида (возможно, на электродах выделяется серебро). Для уточнения того, какие именно изменения происходят в образцах, требуются дальнейшие исследования.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке CRDF (Ek-005-00 [X1]), гранта CRDF и Министерства Образования РФ (BRHE, Post Doctoral Fellowship, award EK-005-X1, annex 7, No Y1-05-09).

## ВЛИЯНИЕ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $C_3N_4$

О.Л. Хейфец-Кобелева<sup>1</sup>, Е.Н. Яковлев<sup>2</sup>, А.Н. Бабушкин<sup>1</sup>,  
V.N. Khabashesku<sup>3</sup>, В.В. Милявский<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Уральский Государственный Университет, Екатеринбург

<sup>2</sup>Институт физики высоких давлений РАН, Троицк

<sup>3</sup>Rice University, Huston, USA

<sup>4</sup>Институт теплофизики экстремальных состояний РАН, Москва

В последние годы большое внимание было уделено исследованию фазовых переходов в  $C_3N_4$ . В настоящей работе были исследованы электрические свойства в образцах  $C_3N_4$ , полученных химическим способом (V.N. Khabashesku) и методом взрыва (В.В. Милявский). Исследования проводились в камере с наковальнями из синтетического алмаза карбонадо. Измерения проводились при напряжениях 0,01–10 В при температуре 300 К на переменном и постоянном токе в области давлений 10–50 ГПа. На каждом образце было снято несколько циклов ввода–вывода давления.

Образцы, полученные химическим способом, в начале измерений имеют сопротивление 100–1000 Ом. После нескольких циклов нагружения–разгрузки сопротивление увеличивается на 5–6 порядков при давлении 25–30 ГПа (снятие нагрузки). При увеличении нагрузки сопротивление опять убывает. Наблюдается гистерезис сопротивления.

Для образцов, полученных взрывным методом, наблюдается монотонное убывание сопротивления во всем исследованном диапазоне давлений.

Из анализа годографов импеданса были обнаружены небольшие изменения сопротивления и тангенса угла диэлектрических потерь в областях давлений 23–25 ГПа, 33–35 ГПа и 23–30 ГПа, 40 ГПа для образцов, полученных химическим путем и методом взрыва, соответственно.

После разгрузки образцы были исследованы под оптическим микроскопом с увеличением до 1500 раз. На фотографиях видны мелкие прозрачные кристаллы неизвестной природы среди основной фазы. После длительной выдержки под давлением 43 ГПа в образце, полученном химическим путем, наблюдается больше кристаллов, чем в образце без выдержки и в образце, полученном взрывом.

В результате проведенных исследований были сделаны следующие выводы:

1. В образце, полученном химическим путем, существуют фазовые переходы при давлениях 20–25 ГПа и 33–35 ГПа с возможным изменением состава. Нагружение образца до давления 43 ГПа приводит к появлению в образце новой низкопроводящей фазы (возможно, алмаза). Выдержка под давлением приводит к стабилизации низкопроводящей фазы. Высокое напряжение способствует более быстрому появлению низкопроводящей фазы.
2. В образце, синтезированном с помощью взрыва, существуют две разные фазы (высокопроводящая и низкопроводящая), что вероятно, связано с первоначальной неоднородностью образца.
3. Таким образом, видно, что свойства  $C_3N_4$  сильно зависят от метода получения образца и его первоначальной чистоты.

Исследования выполнены при частичной финансовой поддержке CRDF (Ek-005-00 [X1]), гранта CRDF и Министерства Образования РФ (BRHE, Post Doctoral Fellowship, award EK-005-X1, annex 7, No Y1-05-09).

## АДСОРБЦИОННАЯ ДЕФОРМАЦИЯ ПОРИСТЫХ ТЕЛ

Ю.К. Товбин, В.Н. Комаров

ГНЦ РФ “Научно-исследовательский физико-химический институт им.  
Л.Я. Карпова”, Москва

В последние годы получены новые экспериментальные данные о влиянии адсорбированных молекул газов на объемную деформацию пористых твердых тел [1,2]. Этот эффект наблюдается при поглощении как полярных молекул (типа  $\text{CO}_2$ ), так и инертных газов (например, Ar) в широкой области температур (от 150 до 400 К) и давлений до  $10^2$  МПа. Ранее эффекты влияния газовой фазы на состояние твердого тела наблюдали при образовании сильных “хемосорбированных” связей, а для существенно более слабой “физической” адсорбции эффекты влияния газов не исследовали. Эффект адсорбционной деформации обусловлен большой внутренней удельной поверхностью пористых тел, что приводит к поглощению количества молекул, сопоставимого с количеством атомов твердого тела. Поэтому влияние поглощенных молекул на деформацию тела как минимум на порядок превосходит влияние внешнего давления.

В работе рассмотрена теория адсорбции молекул газовой фазы в активных углях, позволяющая описать эффекты деформации пористого тела. Структурная модель пористого тела представляет собой периодический элемент структуры, который имеет хаотическую ориентацию в пространстве. Периодический элемент состоит из системы параллельно расположенных щелевидных пор, образованных пластинами графита, ограниченных по трем направлениям [3]. Адсорбция описывается в рамках модели решеточного газа [4], которая используется для описания свойств флюида в узких щелевидных порах внутри графита. Межмолекулярные параметры взаимодействия флюида определяли по методике [5] из экспериментальных данных о коэффициенте сжимаемости в объемной фазе при разных температурах и давлениях до  $10^3$  МПа [6]. Параметры взаимодействия молекула – твердое тело определяли по экспериментальным данным об изотермах адсорбции [7].

Получено, что теория отражает экспериментально наблюдаемое немонотонное изменение линейных размеров пористого тела с увеличением внешнего давления газа, который сорбируется этим телом. При малых давлениях размер тела уменьшается, а при увеличении давления – увеличивается. Построены эффективные коэффициенты изотермической сжимаемости и теплового расширения пористого тела как функции внешнего давления газа. Теория количественно описывает температурную зависимость изменения линейного размера пористого тела от внешнего давления газа.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (код проекта 03-03-32072а).

- [1] V.Yu. Yakovlev, A.A. Fomkin, A.V. Tvardovski, *J. Colloid Interface Sci.*, **268** (2003) 33
- [2] A.V. Tvardovski, A.A. Fomkin, Yu.I. Tarasevich, A.I. Zhukova, *J. Colloid Interface Sci.*, **212** (1997) 426.
- [3] В.Б. Фенелонов, *Пористый углерод*. Новосибирск. ИК СО РАН. 1995.
- [4] Ю.К. Товбин, *Теория физико-химических процессов на границе газ - твердое тело*, М, Наука. 1990.
- [5] В.Н. Комаров, Ю.К. Товбин, *ТВТ* **41** (2003) 217
- [6] Я.А. Калашников, *Физическая химия веществ при высоких давлениях*. М., Высшая школа, 1987
- [7] W.A. Steele, *The Interactions of Gases with Solid Surfaces*; Pergamon: N.Y., 1974

# ИССЛЕДОВАНИЕ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СОСТОЯНИЙ SiO<sub>2</sub> МЕТОДОМ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ СВЕТА

А.П. Шебанин

*Объединенный институт геологии, геофизики и минералогии СО РАН, Новосибирск*

Сравнительное изучение обычных аморфных состояний вещества и обладающих более высокой плотностью в силу сохранения химического состава и типа ковалентных связей открывает возможности для критической проверки многих теоретических и модельных подходов к описанию аморфного состояния твердых тел. Важной особенностью уплотненных стекол является подавление структурных релаксационных движений, что позволяет более эффективно изучать структуру и динамику вещества по сравнению с обычными стеклами. КР-спектроскопические исследования вносят свой вклад в понимание природы терагерцовой колебательной динамики стекол и ее связь с организацией структуры аморфных материалов на нанометровом масштабе.

Нами проведен сравнительный анализ низкочастотных КР спектров стеклообразного SiO<sub>2</sub> обычной и повышенной плотности с привлечением результатов исследований так называемой метамиктной фазы, получаемой облучением быстрыми нейтронами дозой  $2.2 \cdot 10^{20}$  на см<sup>2</sup> [1]. Ряд образцов плотностью вплоть до 2.68 г/см<sup>3</sup> был получен в установке сверхвысокого давления типа «разрезная сфера» [2]. Регистрация поляризованных и деполяризованных спектров, возбуждаемых линией 514.5 нм, производилась в 90° геометрии рассеяния спектрометром U-1000 при комнатной температуре и при 95 К. В последнем случае температура освещенной части образца определялась из соотношения «стокс/антистокс».

Поляризованные спектры нормировались на интегральную интенсивность моды с частотой вблизи 800 см<sup>-1</sup>. Выяснилось, что частота максимума бозонного пика в спектре образца максимальной плотности приблизительно в два раза больше соответствующего значения для обычного SiO<sub>2</sub>, что соответствует уменьшению характерного размера среднего порядка. Обнаружено резкое уменьшение интенсивности КР сигнала в области частот меньше 10 см<sup>-1</sup>, где преобладает быстрая релаксация [3]. Так, на частоте 10 см<sup>-1</sup> интенсивность спектра в 7.3 раза меньше по сравнению с обычным SiO<sub>2</sub>. Анализ спектров приводит к выводу – идея о том, что свободный объем стеклообразного материала характеризует интенсивность быстрой релаксации, эффективна при анализе свойств аморфного SiO<sub>2</sub>.

- [1] В.К. Малиновский, В.Н. Новиков, Н.В. Суровцев, А.П. Шебанин. *Физика твердого тела* **42** (2000) 62
- [2] Yu.N. Palyanov et al. *Russian Geology and Geophysics* **38** (1997) 920
- [3] V.N. Novikov, A.P. Sokolov et al. *J. Chem. Phys.* **107** (1997) 1057

## РЕЛАКСАЦИЯ СОПРОТИВЛЕНИЯ ГАЛОГЕНИДОВ АММОНИЯ В ОКРЕСТНОСТИ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

Г.В. Тихомирова, А.Н. Бабушкин

*Уральский Государственный Университет им. А.М. Горького, Екатеринбург*

В поликристаллических образцах галогенидов аммония  $\text{NH}_4\text{X}$  ( $\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ ) обнаружен фазовый переход, возникающий под действием высокого давления. Переход проявляется в резком (скачкообразном) изменении сопротивления на несколько (более трех) порядков и сопровождается гистерезисом, характерным для фазовых переходов I рода, с критическими давлениями  $P_{c1}$  и  $P_{c2}$ . А именно, при увеличении давления до  $P_{c2}$  сопротивление скачком уменьшается, а при последующем уменьшении давления образцы переходят обратно в высокоомное состояние при давлении  $P_{c1}$ . Значения  $P_{c1}$  коррелируют с плотностью материала (с расстоянием катион – анион) и составляют 42, 25–27 и 15 ГПа, соответственно, для  $\text{NH}_4\text{F}$ ,  $\text{NH}_4\text{Cl}$  и  $\text{NH}_4\text{Br}$ . Аналогичный скачкообразный переход наблюдается на температурных зависимостях сопротивления при давлениях вблизи критического. Критическое давление  $P_{c2} > P_{c1}$  зависит от предыстории обработки образца, и его не удастся точно определить из-за большого времени установления стационарной проводимости.

Гистерезис наблюдается также на температурных зависимостях сопротивления. Величина петли барического и температурного гистерезиса сопротивления уменьшается с ростом числа циклов приложения и снятия давления и/или длительности выдержки под давлением. Это показывает, что для достижения стабильного состояния изучаемых галогенидов аммония необходима достаточно длительная обработка высоким давлением, причем иногда статической выдержки при фиксированном давлении оказывается недостаточно, и требуется несколько последовательных циклов увеличения–уменьшения давления. Время первоначальной обработки давлением для стабилизации низкоомного состояния различно для всех исследованных материалов. Наблюдается корреляция времени обработки (как и величины  $P_{c1}$ ) с плотностью материалов (атомным весом галогенов F, Cl, Br).

Немонотонность  $R(T)$ , уменьшающаяся при увеличении времени предварительной выдержки образца под давлением, указывает на существование промежуточных (метастабильных) состояний. Все исследованные галогениды аммония при давлениях выше  $P_{c1}$  и некоторой выдержке под давлением переходят в состояние, характеризующееся ростом сопротивления с температурой, подобно галогенидам щелочных металлов.

Исследована релаксация сопротивления галогенидов аммония при изменении давления. Обнаружено, что времена релаксации сопротивления сильно зависят от давления: в области перехода время релаксации сильно увеличивается (от нескольких часов до суток). При давлениях значительно выше  $P_{c1}$  оно составляет несколько минут. Немонотонность (скачки) сопротивления вблизи перехода связаны с неоднородностью (поликристаллической структурой) образца и вызваны, по-видимому, процессами неоднородного уплотнения структуры под давлением.

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ-Урал № 01-03-96494 и фонда CRDF, грант Ек-005-00-Х1 в рамках Уральского НОЦ “Перспективные материалы”.

# СИНТЕЗ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ СОЕДИНЕНИЙ, ОБРАЗУЮЩИХСЯ В СИСТЕМАХ Mg–Sb, Mg–Bi, Mg–B–Sb и Mg–B–Bi

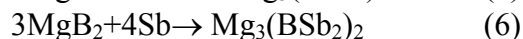
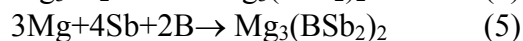
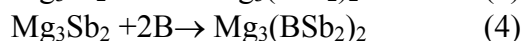
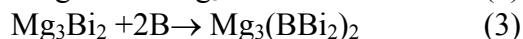
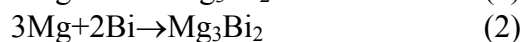
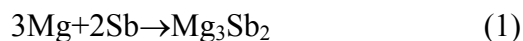
Л.Г. Севастьянова, К.П. Бурдина, М.Г. Жижин, О.К. Гулиш, О.В. Кравченко,  
М.Е. Леонова, В.К. Генчель

*Московский Государственный Университет им. М.В.Ломоносова, Химический факультет, Москва*

Известно [1], что соединения, образующиеся в системе Mg–B–N, являются эффективными катализаторами фазового перехода гексагонального нитрида бора в кубическую модификацию. С целью более детального выяснения роли третьего компонента в этом превращении нами начаты исследования взаимодействия в двойных Mg–Sb, Mg–Bi и тройных Mg–B–Sb, Mg–B–Bi системах. Предполагалось, что соединения, образующиеся из этих систем, будут также проявлять каталитические свойства в фазовом переходе  $\alpha\text{-BN} \rightarrow \beta\text{-BN}$ , но учитывая преимущественно металлический характер висмута и сурьмы, эти свойства и целевой продукт реакции будут иметь свои индивидуальные особенности.

Синтез бинарных и тройных висмутидов и антимонидов проводили путем спекания элементарных веществ или с использованием препергов в интервале температур 700–1100°C и давлений  $10^{-4}$ –7 ГПа в условиях исключающих окисление или гидролиз исходных и конечных веществ.

По реакциям 1–6 были получены соединения следующих составов:



Во всех полученных соединениях в зависимости от условий их синтеза были обнаружены различные кристаллические модификации, проявляющие различные типы (обратимые, необратимые) фазовых превращений, а также фазы высокого давления. Методами ДТА и высокотемпературной дифрактометрии определены температуры фазовых переходов и тип фазового превращения. На основании анализа дифрактометрических данных предложены структуры новых модификаций и рассчитаны параметры их элементарных ячеек. Получены предварительные данные по каталитическим свойствам некоторых из этих веществ в осуществлении фазового перехода  $\alpha\text{-BN} \rightarrow \beta\text{-BN}$ .

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 03-03-32552)

[1] К.П. Бурдина. «Химические аспекты синтеза кубического нитрида бора»  
Автореферат докторской диссертации. Изд. МГУ (2000) 78



## ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ПОД ДАВЛЕНИЕМ РАЗЛИЧНЫМИ МЕТОДАМИ

В.В. Щенников, С.В. Овсянников, Г.В. Воронцов, Вс.В. Щенников<sup>1</sup>

*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*  
<sup>1</sup>*Институт математики и механики УрО РАН, Екатеринбург*

При изучении фазовых превращений в веществах обычно наблюдается кажущееся несоответствие данных, полученных разными методами (по измерениям электропроводности, сжимаемости, оптических и рентгеновских спектров и т.д.). Как показали уже первые исследования П.В. Бриджменом полиморфных превращений в металлах при высоком давлении, скачки электропроводности и объёма, связанные с одним и тем же фазовым переходом, наблюдаются при разных значениях давления. В большинстве случаев причины расхождений, возникающих при регистрации фазовых превращений, детально не обсуждаются, так как неявно предполагается, что они связаны с экспериментальными погрешностями [1].

В настоящей работе предлагается модель “ориентированных фазовых включений”, описывающая термические, электрические, термоэлектрические, гальваномагнитные и термомагнитные свойства в области фазовых превращений под давлением. Модель позволяет варьировать в широких пределах концентрацию и конфигурацию включений фаз [2-4].

Проанализировано большое количество экспериментальных данных, подтверждающих справедливость предложенного подхода [5-7]. Модель позволяет оценить сдвиг давления фазового перехода при его определении разными методами. Например, при переходе типа “полупроводник–металл” изменение термоэдс опережает изменение сопротивления, которое в свою очередь опережает изменение объёма, соответствующее структурному переходу. При переходе “металл–полупроводник” наблюдается обратная последовательность [2-4].

Работы выполнены при частичной поддержке РФФИ (грант 01-02-17203), US CRDF (Gr. No. TGP-599, TGP-656, TGP-1125), и INTAS (Ref. Nr. 03-55-629).

- [1] К. Бредли. Применение техники высоких давлений при исследовании твёрдого тела. М, Мир, 1972
- [2] В.В. Щенников. Физика металлов и металловедение 67 (1989) 94
- [3] V.V. Shchennikov, S.V. Ovsyannikov, G.V. Vorontsov. *Proceedings of SPIE* 4979 (2003) 582
- [4] V.V. Shchennikov, S.V. Ovsyannikov, G.V. Vorontsov, V.V. Shchennikov Jr. *Proceedings of SPIE* 5342 (2004) 239
- [5] В.В. Щенников, С.В. Овсянников. *Письма в ЖЭТФ* 74 (2001) 546
- [6] V.V. Shchennikov, S.V. Ovsyannikov. *Solid State Comm.* **121** (2002) 323
- [7] S.V. Ovsyannikov, V.V. Shchennikov. *Physica E* **17** (2003) 546

## СТРУКТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ СОЕДИНЕНИЯ $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{CuO}_2$ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

С.Е. Кичанов<sup>1</sup>, В.И. Бобровский<sup>3</sup>, В.П. Глазков<sup>2</sup>, Д.П. Козленко<sup>1</sup>, Б.Н. Савенко<sup>1</sup>,  
В.А. Соменков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> ЛНФ ОИЯИ, 141980 Дубна, Россия

<sup>2</sup> РИЦ «Курчатовский институт», 123182 Москва, Россия.

<sup>3</sup> Институт Физики металлов УрО РАН, 620219 Екатеринбург, Россия

Соединение  $\text{SrCuO}_2$  при нормальных условиях имеет орторомбическую структуру и состоит из чередующихся медь-дефицитных слоев или, так называемых, двойных зигзагообразных Cu-O цепочек, и слоев  $(\text{SrO})_2$  [1]. При высоких давлениях  $P \sim 5$  ГПа и температурах  $T \sim 1000$  К в этом соединении происходит фазовый переход из орторомбической фазы «низкого давления» в тетрагональную бесконечно-слоевую фазу – «фазу высокого давления» [2]. Бесконечно-слоевые соединения  $\text{Sr}_{1-x}\text{R}_x\text{CuO}_2$ , где R – редкоземельный элемент (La, Nd, Ba и т.п.), обладают простой кристаллической структурой (пространственная группа  $P4/mmm$ ), не содержащей позиционных параметров атомов и имеют температуру перехода в сверхпроводящее состояние  $T_c \sim 20\text{--}110$  К [3]. Исследования соединений  $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{CuO}_2$  ( $0.05 < x < 0.12$ ) методом рентгеновской дифракции показали, что при нормальных условиях параметры  $a$  и  $c$  тетрагональной ячейки уменьшаются с ростом содержания лантана La по линейному закону. Однако, при  $x > 0.12$  наблюдается сильное отклонение от линейного закона, и это характерно также и для соединений  $\text{Sr}_{1-x}\text{Nd}_x\text{CuO}_2$  [4]. Однако, по данным нейтронографических экспериментов, параметры бесконечно-слоевых соединений линейны во всем диапазоне давлений до 5.8 ГПа. Подобное поведение параметров ячейки свидетельствует об отсутствии уровня «насыщения», который наблюдался при легировании.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований, гранты № 03-02-17387 и № 03-02-16879, Министерства промышленности, науки и технологий РФ, госконтракт № 40.012.1.1.1148 и 40.012.1.1.1166 (договор № 10/02), гранта поддержки уникальных установок России и проекта INTAS № 99-00256.

1. Y. Taguchi, T. Matsumoto, and Y. Tokura *Phys. Rev. B*, **62** (2000) 7015
2. Podlesnyak A., Mirmelstein A., Bobrovskii V. et. al. *Physica C*, **258** (1996) 159
3. Siegrist T., Zahurak S.M., Murphy D. W. et. al. *Nature* **334** (1988) 231
4. Takano M., Takeda Y., Okada H. et. al. *Physica C*, **159** (1988) 231

## ВЛИЯНИЕ УДАРНЫХ ВОЛН НА СТРУКТУРУ И ДЕФОРМАЦИОННОЕ ПОВЕДЕНИЕ АРМКО-ЖЕЛЕЗА

Е.А. Козлов<sup>1</sup>, А.В. Добромыслов<sup>2</sup>, Н.И. Талуц<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*РФЯЦ-ВНИИ технической физики, Снежинск*

<sup>2</sup>*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*

Представлены данные о структуре и параметрах волн напряжений в армко-железе, подвергнутом ударному нагружению скользящей детонацией слоев пластичного взрывчатого вещества (ВВ) на основе ТЭНа ( $\sigma_{\text{макс.}} = 15$  ГПа) толщиной 1, 1.5, 2 мм и более мощного взрывчатого состава (ВС) на основе октогена ( $\sigma_{\text{макс.}} = 25$  ГПа) толщиной 15 и 20 мм. Для регистрации волновых процессов использован метод оптического рычага. Эксперименты различались как типом и толщиной используемого для нагружения образцов слоя ВВ, так и величиной оптического рычага, позволяющей варьировать разрешение методики регистрации при одновременной диагностике как слабых (упругих), так и сильных (пластических) волн.

Получены новые данные по кинетике релаксации напряжений на фронтах упругого и фазового предвестников. Непосредственно при нагружении клиновых образцов скользящей детонацией слоев октоген-содержащего ВС определена толщина слоя, в котором обеспечивались условия, достаточные для протекания  $\alpha$ - $\varepsilon$  превращения.

Проведено сопоставление результатов регистрации многоволновых конфигураций, изменения структуры и параметров волн напряжений по толщине клиновых образцов армко-железа, полученных непосредственно при взрывном нагружении, с данными всесторонних исследований сохраненного в процессе взрывного нагружения вещества. Выявлено протекание  $\alpha$ - $\varepsilon$  фазового превращения в узком слое у поверхности нагружения при нагружении образцов армко-железа скользящей детонацией тонких слоев пластичного ВВ на основе ТЭНа. Отмечено хорошее совпадение границы перехода от трех- к двухволновой конфигурации при нагружении армко-железа октоген-содержащим ВС с положением границы перехода от плато с высокими значениями микротвердости  $H_{\mu}(x)$  и твердости  $H_{\nu}(x)$  к участку их резкого уменьшения, связанного с переходом от области полного  $\alpha$ - $\varepsilon$  превращения к области, в которой  $\alpha$ - $\varepsilon$  превращение протекало только частично.

Анализ деформационной структуры образцов, претерпевших ударно-волновое нагружение различной амплитуды и длительности, показал, что высокоскоростная деформация армко-железа осуществляется скольжением и двойникованием. В том случае, когда деформация осуществляется в  $\alpha$ -фазе при металлографическом исследовании наблюдаются только деформационные двойники, плотность которых коррелирует с напряжением на фронте ударной волны. В том случае, когда деформация осуществляется в  $\varepsilon$ -фазе при металлографическом исследовании наблюдаются многочисленные линии скольжения и небольшое количество двойников, которые образуются, по всей видимости, в  $\alpha$ -фазе на стадии пластической волны 1. Появление большого количества линий скольжения в образцах при напряжении на фронте ударной волны больше критического давления перехода в  $\varepsilon$ -фазу свидетельствует о том, что деформация армко-железа в  $\varepsilon$ -фазе осуществляется скольжением.

# ВЛИЯНИЕ СФЕРИЧЕСКИ СХОДЯЩИХСЯ УДАРНЫХ ВОЛН НА СТРУКТУРНОЕ И ФАЗОВОЕ СОСТОЯНИЕ СПЛАВОВ ЦИРКОНИЯ С НИОБИЕМ

Н.И. Талуц<sup>1</sup>, А.В. Добромыслов<sup>1</sup>, Е.А. Козлов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>РФЯЦ-Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики, Снежинск

Цирконий и его сплавы принадлежат к числу немногочисленных веществ, фазы высокого давления которых сохраняются в метастабильном состоянии после прекращения воздействия. Это позволяет изучать механизм образования фазы высокого давления ( $\omega$ -фазы в этих материалах), условия ее стабильности и особенности высокоскоростной пластической деформации. Целью данной работы являлось изучение структуры и фазового состояния сплавов Zr–1мас.% Nb и Zr–2,5мас.% Nb, подвергнутых нагружению сферически сходящимися ударными волнами различной интенсивности (начальные радиусы шаров 35 и 32 мм). Начальное давление на поверхности шаров превышало 30 ГПа. Изучение сохраненных образцов проводили методами рентгеноструктурного анализа, оптической металлографии, просвечивающей электронной микроскопии и измерением микротвердости вдоль радиуса.

Образцы после нагружения имеют форму толстостенной сферической оболочки. В случае высокоинтенсивного режима нагружения вокруг центральной полости наблюдается область нестабильного пластического течения. В исходном состоянии сплавы имеют двухфазную структуру, состоящую из  $\alpha$ -фазы и  $\beta$ -фазы циркония обогатенной ниобием. Фазовое состояние образцов существенно зависит от условий нагружения и глубины залегания слоя. Омега-фаза присутствует в образцах только после низкоинтенсивного режима нагружения. Ее количество максимально вблизи внешней поверхности шаров и уменьшается при приближении к полости. Количество  $\omega$ -фазы в сплаве Zr–2,5% Nb существенно больше, чем в сплаве Zr–1% Nb. Периоды решетки  $\omega$ -фазы в этих сплавах  $a = 0,5036$  нм,  $c = 0,3130$  нм,  $c/a = 0,622$ . После высокоинтенсивного режима нагружения  $\omega$ -фаза в сплавах не сохраняется из-за высоких остаточных температур.

Структура образцов после низкоинтенсивного режима нагружения сильно фрагментирована. Внутри фрагментов наблюдается специфическая полосчатость. По внешнему виду отличить  $\alpha$ -фазу от  $\omega$ -фазы не удастся, так как они имеют одинаковую морфологию. После высокоинтенсивного режима нагружения в структуре приповерхностных слоев шара из сплава Zr–1% Nb наблюдаются фрагменты с хорошо выраженными границами, что указывает на протекание полигонизационных процессов. Большие рекристаллизованные зерна обнаруживаются в слоях, имеющих минимальные значения микротвердости. При дальнейшем увеличении глубины залегания слоя в структуре появляются области с перлитной и бейнитной морфологией. В слоях вблизи полости встречаются участки с мартенситной структурой. В шаре из сплава Zr–2,5% Nb изменение структуры с увеличением глубины залегания слоя происходит в целом аналогично, только на других расстояниях от поверхности шара.

Работа частично выполнена в рамках комплексной программы Президиума РАН на 2004 г. “Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий”.

**EXTERNAL ELECTRICAL HEATING FOR THE DIAMOND ANVIL CELL:  
IMPLICATION FOR INVESTIGATIONS OF  
THE STRUCTURE AND PROPERTIES OF THE HIGH-PRESSURE PHASES**

N.A. Dubrovinskaia, L.S. Dubrovinsky

*Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, 95440 Bayreuth, Germany*

An external heating assemblage allowing DAC experiments at megabar pressures and temperatures above 1200 K was constructed. The complete high-pressure high temperature system consists of an anvil assembly made from a special high-temperature alloy, a mechanical loading mechanism, and external resistive heaters placed around the cell. The new system allows fine adjustment of the pressure (within 1 GPa) over the whole temperature range. It maintains constant pressure (within 1 GPa at megabar pressures) and constant temperature (within 5 K at 1000 K) for several hours. Temperature is measured with an external thermocouple. The pressure chamber does not have a measurable temperature gradient. The new heating assemblage is easily coupled with experimental set up at synchrotron radiation facilities and Raman spectrometers.

We tested the performance of the new system by studying phase transformations and the thermal expansion of Fe–Ni and Fe–Si alloys at different pressures and by studying phase transformations in TiO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O.

# ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ НАГРУЖЕНИЯ ПРИ СТАТИЧЕСКОМ СЖАТИИ НА РАЗВИТИЕ МАРТЕНСИТНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ТЕКСТУРИРОВАННЫХ ОБРАЗЦАХ CVD-BN

В.Ф. Бритун<sup>1</sup>, А.В. Курдюмов<sup>1</sup>, И.А. Петруша<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАНУ, Киев

<sup>2</sup>Институт сверхтвердых материалов им. В.Н. Бакуля НАНУ, Киев

Исследовано влияние отклонений от гидростатических условий сжатия высоко-текстурированных образцов пиролитического BN на превращения графитоподобных модификаций нитрида бора (гексагональной –  $BN_r$  и ромбоэдрической –  $BN_p$ ) в плотные алмазоподобные фазы ( $BN_{пл}$ ).

Исходные образцы графитоподобного пиро-BN представляли собой беспористые пластины с ромбоэдрической структурой ( $BN_p$ ). Гексагональную графитоподобную модификацию ( $BN_r$ ) получали с помощью превращения  $BN_p \rightarrow BN_r$  при  $2400^\circ\text{C}$  и давлении 3 ГПа. Высокие степени текстуры и структурной упорядоченности исходного  $BN_p$  при этом сохранялись в образующемся  $BN_r$ . Превращения обеих графитоподобных фаз в плотные фазы типа вюртцита ( $BN_v$ ) и сфалерита ( $BN_{сф}$ ) осуществляли в аппарате типа “белт” при давлении 7.7 ГПа и температурах от 200 до  $2500^\circ\text{C}$ . В качестве передающей давление среды использовали порошки NaCl и  $BN_r$ , обеспечивающие, соответственно, гидро- и негидростатические условия сжатия. Исследования фазового состава образцов после воздействия высоких давлений показали, что в условиях гидростатики превращения  $BN_p$  в  $BN_{пл}$  протекают при значительно более низких температурах, чем превращения  $BN_r$ , а отклонение от гидростатики приводит к ускорению превращений, причем в случае исходного  $BN_r$  этот эффект проявляется сильнее. Полученные результаты объясняются тем, что мартенситные механизмы перестройки решеток  $BN_r$  и  $BN_p$  при образовании  $BN_v$  различны [1] и, как следствие, различны термодинамические движущие силы и кинетические барьеры превращений [2].

Кристаллоориентированный характер мартенситных превращений  $BN_r \rightarrow BN_v \rightarrow BN_{сф}$  и  $BN_p \rightarrow BN_v \rightarrow BN_{сф}$  обеспечивают сохранение высокотекстурированного состояния исходных фаз в пиро-BN, но оси текстур  $BN_{пл}$  различны из-за различия механизмов мартенситной перестройки.

[1] В.Ф. Бритун, А.В. Курдюмов. *Сверхтвердые материалы*, №2 (2001) 3

[2] В.Ф. Бритун, А.В. Курдюмов, И.А. Петруша. *Физ.-тех. выс. давл.* **13**(3) (2003) 11

## СРАВНИТЕЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДАВЛЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКУЮ СТРУКТУРУ АМИНОКИСЛОТЫ L-СЕРИНА

Е.В. Болдырева<sup>1,2</sup>, Е.Н. Колесник<sup>2</sup>, Т.Н. Дребущак<sup>1,2</sup>, Г. Ахсбахс<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН*

<sup>2</sup>*Новосибирский Государственный Университет, НОЦ “Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии”*

<sup>3</sup>*Филиппс-Университет, Марбург, ФРГ*

Исследования отклика структуры молекулярных кристаллов на скалярные воздействия (понижение температуры и повышение давления) оказываются полезными при изучении природы и детальных характеристик межмолекулярных взаимодействий в сложных супрамолекулярных системах.

Влияние на кристаллический *L*-серин (пр. гр.  $P2_12_12_1$ ) гидростатического давления до 4.5 ГПа исследовано методом порошковой дифракции с использованием источника синхротронного излучения с двухкоординатным детектором MAR345. Для создания гидростатического давления в алмазных наковальнях использована безводная смесь метанол + этанол. Расстояние до детектора и длина волны откалиброваны по кремнию, давление определено по смещению полосы люминесценции рубина. Фазовых превращений в *L*-серине в исследованной области давлений не обнаружено. При повышении давления сжатие структуры анизотропно, максимально в направлении оси, вдоль которой направлены водородные связи двух типов, в том числе образованные боковыми ОН-группами.

Исследование структурных изменений в *L*-серине в интервале температур 100 – 325 К выполнено на монокристалльном четырехкружном дифрактометре фирмы STOE, контроль температуры осуществлялся с помощью системы Cryostream Cooler (Oxford Cryosystem). Монокристаллы безводного *L*-серина были получены из водно-этанольного раствора. Параметры ячейки уточнялись с шагом по температуре около 25 К, сбор данных, расшифровка и уточнение структуры проведены при температурах 100, 200 и 300 К. Проанализированы анизотропия термического расширения, изменения внутренней геометрии молекулы, поведение водородных связей в кристалле. При охлаждении относительное уменьшение линейных размеров практически одинаково вдоль двух кристаллографических осей. Вдоль третьей оси, самой короткой, наблюдается некоторое увеличение линейных размеров при общем объемном сжатии структуры.

Проведено сравнение отклика структуры на понижение температуры и повышение давления. Анизотропия деформации структуры при разных видах скалярного воздействия различна. Такое поведение характерно и для некоторых других изученных нами ранее молекулярных кристаллов (глицин, парацетамол).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 02-03-33358), программы BRNE (грант NO-008-X1), Минобразования РФ (грант Ч0069), программы «Университеты России» (грант ур.05.01.021)

## ЛОКАЛИЗАЦИЯ ВОДОРОДА И ДЕЙТЕРИЯ В $\beta$ -МАРГАНЦЕ

В.К. Федотов<sup>1</sup>, В.Е. Антонов<sup>1</sup>, Г. Гроссе<sup>2</sup>, Т. Хансен<sup>3</sup>, Б. Хаубак<sup>4</sup>, А.С. Иванов<sup>3</sup>,  
А.И. Колесников<sup>1</sup>, В.В. Сиколенко<sup>5</sup>, В.Г. Симкин<sup>5</sup>, В.А. Яртысь<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

<sup>2</sup>*Technische Universität München, Garching, Germany*

<sup>3</sup>*Institute Laue-Langevin, Grenoble, France*

<sup>4</sup>*Institute for Energy Technology, Kjeller, Norway*

<sup>5</sup>*Объединенный институт ядерных исследований, Дубна*

Растворимость водорода в  $\alpha$  и  $\beta$  модификациях марганца при высоких давлениях достигает нескольких ат. % [1], что открывает возможность применения нейтронных методов для исследования твердых растворов  $\alpha$ -MnH<sub>x</sub> и  $\beta$ -MnH<sub>x</sub>. Наши нейтрон-дифракционные исследования показали [2], что в  $\alpha$ -Mn атомы водорода занимают позиции  $12e$  (простр. гр.  $I\bar{4}3m$ ) в двуйном потенциале с расстоянием между минимумами  $\approx 0.7$  Å. Результаты по неупругому рассеянию нейтронов (НРН) дают убедительные доказательства низкой симметрии этих позиций и сильного туннельного эффекта [3].

В данной работе представлены результаты дифракционного изучения твердых растворов 10.8 at.% D и 9.6 at.% H в  $\beta$ -Mn, проведенного на нейтронных дифрактометрах D1B в ИЛЛ (Гренобль) и HRFD в ОИЯИ (Дубна). Показано, что водород и дейтерий образуют необычную подрешетку в  $\beta$ -Mn и занимают, по предварительным данным, позиции  $12d$  ( $1/8, y, y+1/4$ ) исходной кубической простр. гр.  $P4_132$  (No. 213). Спектр оптических колебаний водорода в фазе MnH<sub>0.096</sub> был изучен методом НРН при температуре 5 К на спектрометре IN1 BeF в ИЛЛ. Было обнаружено, что фундаментальная зона оптических колебаний водорода расщеплена на два пика в согласии с симметрией H позиции.

- [1] V.E. Antonov, T.E. Antonova, N.A. Chirin, E.G. Ponyatovsky, M. Baier, F.E. Wagner, *Scripta Mater.* **34** (1996) 1331
- [2] V.K. Fedotov, V.E. Antonov, K. Cornell, G. Grosse, A.I. Kolesnikov, V.V. Sikolenko, V.V. Sumin, F.E. Wagner, H. Wipf, *J. Phys.: Condens. Matter* **10** (1998) 5255
- [3] A.I. Kolesnikov, V.E. Antonov, S.M. Bennington, B. Dorner, V.K. Fedotov, G. Grosse, J.C. Li, S.F. Parker, F.E. Wagner, *Physica B* **263-264** (1999) 421



## ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В СИСТЕМАХ Mo–D И Mo–H

В.Е. Антонов<sup>1</sup>, А.И. Латынин<sup>1</sup>, М. Ткач<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка

<sup>2</sup>Институт физической химии ПАН, ул. Капишана 44/52, 01-224 Варшава, Польша

Построена  $T$ – $P$  фазовая диаграмма системы Mo–D при давлениях дейтерия до 6 ГПа и температурах до 550°C и проанализированы причины ее отличия от изученной ранее диаграммы системы Mo–H. В результате установлена причина сильной асимметрии барического гистерезиса в системах металл–водород, предложен способ расчета стандартных энтальпии и энтропии гидридов и дейтеридов высокого давления по экспериментальным  $T$ – $P$  диаграммам, а также способ расчета  $T$ – $P$  диаграмм систем металл–водород для одного из изотопов водорода по известным диаграммам для другого изотопа.

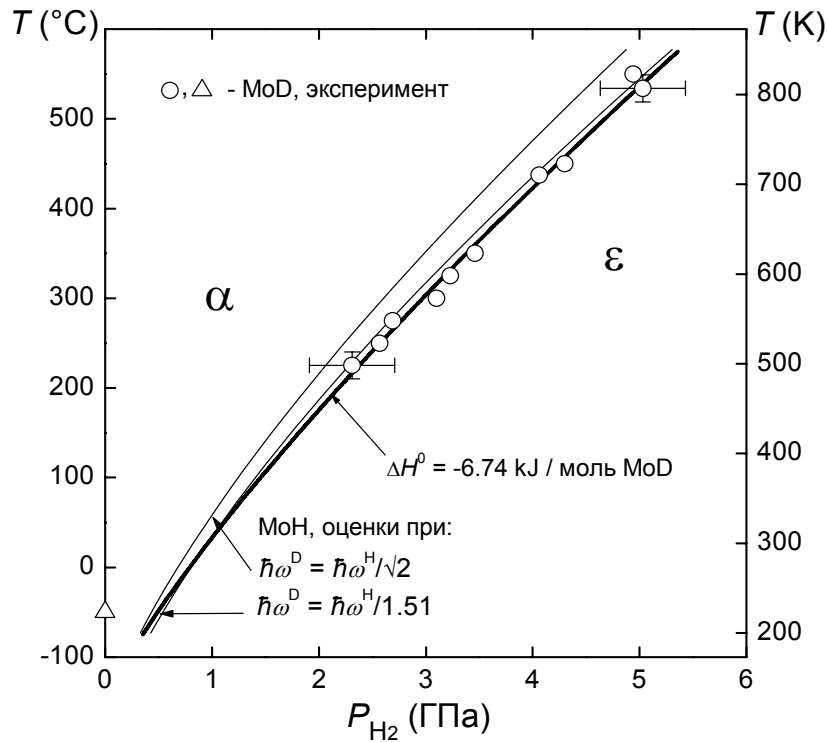


Рис. 1. Экспериментальные значения давления разложения дейтерида молибдена (значки), наиболее вероятное расположение линии равновесия  $\text{Mo} + \frac{1}{2}\text{D}_2 = \text{MoD}$  (толстая кривая) и расчетные линии равновесия  $\text{Mo} + \frac{1}{2}\text{H}_2 = \text{MoH}$  (две тонкие линии) при двух предельно допустимых значениях частоты колебаний атомов D в дейтериде молибдена, пока не определенной экспериментально, по отношению к частоте колебаний атомов H в гидриде молибдена.

## НЕЙТРОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГЦК МОНОГИДРИДА КОБАЛЬТА

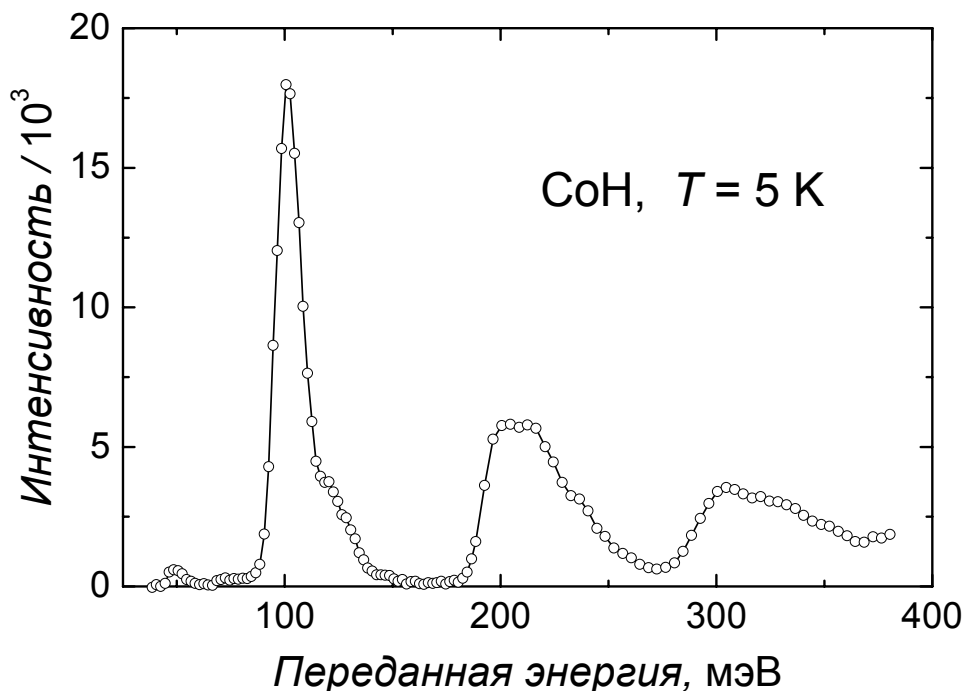
В.Е. Антонов<sup>1</sup>, Т.Е. Антонова<sup>1</sup>, В.К. Федотов<sup>1</sup>, Т. Хансен<sup>2</sup>, А.И. Колесников<sup>1</sup>,  
А.С. Иванов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка

<sup>2</sup>Институт Лауэ-Ланжевена, Гренобль, Франция

Моногидрид CoH с ГЦК решеткой металла образуется только при высоком давлении водорода [1]. Образец этого гидрида весом 0.4 г был получен при давлении 9 ГПа и температуре 350°C и затем исследован при атмосферном давлении методом нейтронной дифракции при температуре 95 К и методом неупругого рассеяния нейтронов (НРН) при 5 К. Профильный анализ нейтрон-дифракционной картины показал, что водород занимает октаэдрические междоузлия в ГЦК решетке CoH и что гидрид является ферромагнетиком с магнитным моментом 1.3  $\mu_B$  / атом Co, в согласии с результатами магнитных измерений [2]. Фундаментальная полоса оптических колебаний водорода в спектре НРН (см. рисунок) состоит из интенсивного пика при 102 мЭВ с широким плечом со стороны высоких энергий. Форма НРН спектра типична для ГПУ и ГЦК моногидридов 3d- и 4d-металлов, а положение пика как функции расстояния водород-металл согласуется с зависимостью, установленной для этих гидридов [3].

- [1] В.Е. Антонов, И.Т. Белаш, В.Ю. Малышев, Е.Г. Понятовский, *ДАН СССР* **272** (1983) 1147  
[2] I.T. Belash, V.Yu. Malyshev, B.K. Ponomarev, E.G. Ponyatovskii, A.Yu. Sokolov, *Sov. Phys. Solid State* **28** (1986) 741  
[3] V.E. Antonov, K. Cornell, B. Dorner, V.K. Fedotov, G. Grosse, A.I. Kolesnikov, F.E. Wagner, H. Wipf, *Solid State Commun.* **113** (2000) 569



## СТРУКТУРНОЕ СОСТОЯНИЕ ВОДЫ В УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ И ВБЛИЗИ ИХ ВНЕШНИХ ПОВЕРХНОСТЕЙ

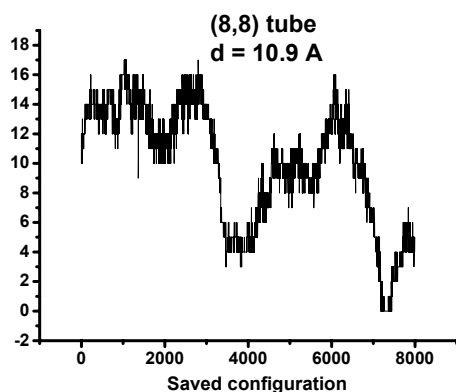
Ю.Г. Бушуев<sup>1,2</sup>, С.В. Давлетбаева<sup>2</sup>, Т.А. Дубинкина<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ГОУВПО "Ивановский государственный химико-технологический университет", Иваново

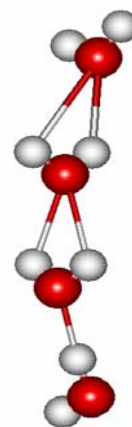
<sup>2</sup>Институт химии растворов РАН, Иваново

<sup>3</sup>ГОУВПО "Ивановская государственная архитектурно-строительная академия", Иваново

В настоящее время накоплен значительный экспериментальный материал о свойствах и структуре жидкой воды, о ее кристаллических и аморфных модификациях. Однако установлены далеко не все аномалии воды и особенности структурообразования в водных системах. Недавно были открыты лед-ХII и новая форма аморфного льда (VHDA); показано, что внутри углеродных нанотрубок образуется ранее неизвестная форма льда [1]. При протекании воды и водных растворов через нанотрубки генерируется электрический ток [2]. Сведения о молекулярных механизмах, этапах и природе структурных преобразований воды вблизи границы раздела фаз практически полностью отсутствуют. Результаты компьютерного моделирования указывают на возможность существования необычного явления – помещенный в воду фрагмент гидрофобной углеродной трубки только часть времени заполнен водой [3]. Мы расширили класс исследуемых объектов (трубки (9,0)–(14,0), (6,6)–(10,10)) и изменили потенциал межмолекулярных взаимодействий (BMW), в результате получены пульсации потока молекул, проходящего по трубкам [4]. Наши вычисления показывают, что заселенности состояний димеров воды, находящихся внутри трубки и вблизи ее поверхности, существенно различаются. Топологические свойства системы водородных связей воды не зависят от хиральности трубок, но существенно зависят от диаметра трубок.



Флуктуации числа молекул воды внутри фрагмента нанотрубки



Кластер из молекул воды в нанотрубке (6,6)

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 04-03-32363а).

- [1] K. Koga, G.T. Gao, H. Tanaka, X.C. Zeng. *Nature* **412** (2001) 802
- [2] Sh. Ghosh, A.K. Sood, N. Kumar. *Science* **299** (2003) 1042
- [3] G. Hummer, J. C. Rasaiah, J. P. Noworyta. *Nature* **414** (2001) 188
- [4] Yu.G. Bushuev, S.V. Davletbaeva, F.F. Muguet. *Molecules* **8** (2003) 226

## СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ РОМБООДРИЧЕСКОЙ ФАЗЫ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ C<sub>60</sub>

Г.Е. Абросимова, И.О. Башкин, О.Г. Рыбченко, В.Ш. Шехтман

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

Методом рентгеновской порошковой дифрактометрии изучена структура фазы высокого давления C<sub>60</sub>, полученной при давлении 5.5 ГПа и температуре 920 К. Показано, что способ чередования гексагональных полимеризованных слоев в структуре ромбоэдрической фазы высокого давления отличен от предложенного в [1] и соответствует модели, энергетически более стабильной по расчетам [2]. Различие этих двух способов упаковки заключается во взаимной ориентации молекул фуллерена, принадлежащих соседним полимеризованным слоям: в одном случае молекулы, находящиеся в соседних плоскостях, развернуты друг к другу пятиугольными гранями, в другом случае – шестиугольными. На дифрактограммах различие этих двух моделей проявляется в основном в области больших брегговских углов. Выбор был сделан на основании сравнения модельных и экспериментальных рентгенограмм.

Обсуждено образование сильно выраженной текстуры в образцах фуллерена в процессе термобарической обработки в квазигидростатических условиях. Проведен качественный анализ текстуры. Показано, что направлению максимального сжатия (нормали к поверхности образца – таблетки) соответствуют в ромбоэдрической решетке полимеризованной фазы кристаллографические направления [110] и [100], вдоль которых ориентированы полимерные связи.

- [1] M. Nunez-Regueiro, L. Marques, J.-L. Hodeau, O. Bethoux, M. Perroux. *Phys. Rev. Lett.*, **74** (1995) 278
- [2] А.В. Дзябченко, В.Н. Агафонов, В.А. Давыдов. *Кристаллография* **44** (1999) 17

## ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА МАССИВНОГО АМОРФНОГО ПОЛУПРОВОДНИКА $(\text{GaSb})_{38}\text{Ge}_{24}$

А.И. Колюбакин, В.Е. Антонов, О.И. Баркалов, А.И. Харкунов

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

Стабильные и метастабильные фазовые превращения сплава  $(\text{GaSb})_{38}\text{Ge}_{24}$  были подробно исследованы в широком интервале давлений и температур, что позволило отработать метод получения массивного аморфного сплава [1]. Структура получаемых образцов была исследована методом нейтронной дифракции и смоделирована с помощью метода обратного Монте Карло [2]. Было показано, что аморфные образцы однородны по всему объему и свободны от включений кристаллических фаз. Первое координационное число (число ближайших соседей) составило 4.25, что существенно отличается от 4 и указывает на заметное искажение тетраэдрического окружения атомов в сплаве. Атомы Ge случайным образом замещают атомы Ga и Sb в позициях атомной сетки аморфного полупроводника GaSb, исследованного нами ранее [2]. Причем, в расположении атомов Ga и Sb наблюдается приблизительно та же степень беспорядка, что и в аморфном GaSb, около 30 % ближайших соседей являются атомами одного сорта (пары Ga–Ga или Sb–Sb).

Температурные зависимости проводимости и термоэдс на постоянном токе были исследованы в интервалах температур 110–420 К и 17–410 К, соответственно. Образцы сплава для электрофизических измерений готовили методом спонтанной твердотельной аморфизации закаленной фазы высокого давления при ее нагреве в интервале температур от 77 до 430 К при атмосферном давлении. В отличие от аморфного GaSb, полученного тем же методом ранее и имевшего необычную комбинацию транспортных свойств [3], аморфный  $(\text{GaSb})_{76}\text{Ge}_{24}$  оказался полупроводником *p*-типа, электрофизические свойства которого хорошо описываются классической моделью Мота-Дэвиса. Проводимость определяется термически активируемыми прыжками дырок в хвосте валентной зоны. Энергия активации составляет 0.2–0.3 эВ. Край хвоста валентной зоны расположен на 0.05 эВ ниже уровня Ферми. Таким образом, определен интервал концентраций аморфных сплавов GaSb–Ge, в котором происходит существенная перестройка зонной структуры, приводящая к появлению щели между уровнем Ферми и хвостом валентной зоны.

Один из авторов, О.И.Б., выражает благодарность «Фонду содействия отечественной науке» за финансовую поддержку.

- [1] V.E. Antonov, O.I. Barkalov, E.G. Ponyatovsky and S.A. Zavolovich, *High Pressure Research* **15** (1997) 2001
- [2] A.I. Kolesnikov, O.I. Barkalov, M. Calvo-Dahlborg, U. Dahlborg, W.S. Howells and E.G. Ponyatovsky, *Phys. Rev. B* **62** (2000) 9372
- [3] V.E. Antonov, O.I. Barkalov, A.I. Kolyubakin and E.G. Ponyatovsky, *Phys. Stat. Sol. (b)* **198** (1996) 497

# СТРУКТУРА И СОСТАВ АЛЮМИНИДОВ ЦИРКОНИЯ В СПЛАВЕ Al–Zr ПОСЛЕ ИНТЕНСИВНОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ СФЕРИЧЕСКИМИ УДАРНО-ИЗОЭНТРОПИЧЕСКИМИ ВОЛНАМИ

Д.В. Башлыков<sup>1</sup>, И.Г. Бродова<sup>1</sup>, Е.А. Козлов<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Институт физики металлов УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия*

<sup>2</sup> *РФЯЦ ВНИИТФ, г. Снежинск, Челябинская область, Россия*

Немалый интерес исследователей вызывают способы получения новых фазовых и структурных состояний многофазных материалов при помощи больших пластических деформаций, таких как сдвиг под давлением и равноканальное угловое прессование. При этом поведение различных фаз в матричной основе материала является сложным и неоднозначным процессом. Данная работа направлена на исследование изменения структуры алюминидов Al<sub>3</sub>Zr при высокоскоростной деформации сплава Al–Zr.

Ранее исследованы особенности ударно-волнового плавления двухфазных сплавов Al с переходными металлами Ti, Zr, Hf и определены условия плавления Al матрицы [1,2]. В данной работе реализованы более интенсивные режимы взрывного нагружения, позволившие обеспечить фазовые и структурные превращения в тугоплавких интерметаллидах.

Комплексное исследование структуры, фазового состава и микротвердости по радиусу обжато и сохраненного шара диаметром 40 мм показало наличие широкой зоны плавления, в которой при последующей неравновесной кристаллизации происходит зарождение и рост отличных по форме и кристаллическому строению метастабильных алюминидов с кубической решеткой типа  $L1_2$  (вместо тетрагональной решетки типа  $DO_{23}$ ). Появление фазы с объемом, меньшим объема исходной фазы, может служить косвенным доказательством того, что плавление реализовалось на ударной адиабате.

Метастабильные алюминиды инициируют формирование микрокристаллической матрицы с размером зерна 15 мкм. Таким образом, при ударно-волновом плавлении возможен синтез двухфазных композитов с твердостью 1 ГПа, состоящих из пластичной Al матрицы и дисперсных 5 микронных алюминидов циркония.

Работа выполнена при поддержке комплексной программы Президиума Российской академии наук "Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий".

1. Е.А. Kozlov, I.G. Brodova, D.V. Bashlykov et. al. *Phys. Met. Metallogr.* **87**(3) (1999) 34
2. Е.А. Kozlov, I.G. Brodova, D.V. Bashlykov et. al. *J. Phys. IV France* **10** (2000) 761

## О ТРЕХ СЦЕНАРИЯХ ЭЛЕКТРОННОГО ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА МЕТАЛЛ-ИЗОЛЯТОР В ПОЛУПРОВОДНИКАХ ПОД ДАВЛЕНИЕМ

М.И. Даунов, И.К. Камилов, С.Ф. Габиров

Институт физики Дагестанского научного центра РАН, Махачкала,  
367003, М.Ярагского, 94

При изотропном сжатии кристаллической решетки расстояние между примесными центрами сокращается и их концентрация  $N_i$ , соответственно, растет (объемно-концентрационный эффект [1]). Однако в узкозонных прямозонных полупроводниках  $n$ -типа с кейновским законом дисперсии значительно сильнее изменяется борковский радиус “водородоподобных” доноров ( $a_B$ ). Например, в электронных InSb, InAs, CdSnAs<sub>2</sub>, CdGeAs<sub>2</sub> с учетом полученной экспериментально зависимости диэлектрической проницаемости от давления [1]  $a_B = a_{B0} \cdot \left[ \left( 1 + \beta P / \varepsilon_{g0} \right) \left( 1 + \Theta P / \varepsilon_{g0} \right) \right]^{-1}$  ( $P$  – давление, ГПа;  $\varepsilon_g$  – ширина запрещенной зоны, эВ;  $\beta = d\varepsilon_g/dP$ ,  $\Theta = 0.025$  эВ/ГПа; значок “0” соответствует  $P = 10^{-4}$  ГПа). Отсюда следует, что в окрестности перехода на “металлической” стороне будет наблюдаться специфический эффект “барического вымораживания” электронов на мелкие доноры. По зависимостям перколяционного магнитосопротивления [2] и др. кинетических коэффициентов от давления в  $p$ -CdSnAs<sub>2</sub><Cu> рассчитана критическая концентрация  $N_i^{cr}$  резонансных глубоких акцепторных центров в зависимости от плотности состояний зоны проводимости  $g(\varepsilon)$  [3]: при убывании  $g(\varepsilon)$  (с увеличением давления)  $N_i^{cr}$  возрастает. Экстраполяцией к нулевой температуре определены минимальные при  $N_i = N_i^{cr}$  значения металлической проводимости в системах электронов зоны проводимости и дырок акцепторной зоны.

Электронные фазовые переходы металл-изолятор происходят по трем сценариям. В слабо легированных полупроводниках в системе мелких “водородоподобных” примесных центров (1): в широкозонных полупроводниках переход реализуется в примесной зоне до ее слияния с зоной проводимости – переход Мотта; (2) в узкозонных полупроводниках переход стимулируется наложением примесных состояний на зонный континуум и их гибридизацией – резонансно-гибридизационная версия перехода Мотта [3]; (3) в сильнолегированных полупроводниках переход металл-изолятор происходит в результате компенсации – “андерсоновская” локализация. Построены соответствующие фазовые диаграммы в области промежуточного легирования с использованием уточненного критерия андерсоновской локализации и данных по  $n$ -InSb [4].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 02-02-17888)

- [1] М.И. Даунов, А.Б. Магомедов, А.Э. Рамазанова. *ФТП*. **15** (1985) 936
- [2] M.I. Daunov, I.K. Kamilov, A.B. Magomedov. *Phys. Stat. Sol. (b)*. **211** (1999) 553
- [3] И.К. Камилов, М.И. Даунов, В.А. Елизаров, А.Б. Магомедов. *Письма в ЖЭТФ*. **54** (1991) 589
- [4] М.И. Даунов, И.К. Камилов, В.А. Елизаров. *ФТТ*. **37** (1995) 2276

# КВАЗИБЕСЩЕЛЕВОЙ ПОЛУПРОВОДНИК ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ – МОДЕЛЬ АМОРФНОГО ПОЛУПРОВОДНИКА

М.И. Даунов, И.К. Камилов, С.Ф. Габиров

*Институт физики Дагестанского научного центра РАН, г. Махачкала, Россия*

Перспективными объектами с целью моделирования аморфного полупроводника являются квазибесщелевые полупроводники (КБП), подвергнутые воздействию высоких давлений. КБП – это кристаллические полупроводники, бесщелевое состояние в которых формируется в результате смыкания состояний собственной зоны и примесной зоны с противоположным знаком проводимости и с коэффициентом заселенности  $0 \leq K_3 \leq 1$  [1-3]. Экспериментальные данные о явлениях переноса в КБП, в отличие от аморфных полупроводников, позволяют провести детальный количественный анализ, в частности, разделить электропроводность на произведение концентрации и подвижности в области прыжковой проводимости, естественным образом объяснить наблюдаемое в некоторых с малой щелью подвижностей аморфных полупроводниках сочетание отрицательного знака коэффициента Холла и положительного знака термоэдс и т.д. [1].

В интервале температуры  $2 \div 300$  К в зависимости от всестороннего давления до 1.5 ГПа [1,3] и 7 ГПа [2], электрического – до 250 В/см и магнитного – до 20 кЭ полей в диапазоне изменения концентрации избыточных акцепторов  $10^{10} \div 10^{17}$  см<sup>-3</sup> проведены комплексные измерения кинетических коэффициентов кристаллов КБП *p*-типа Ge<Au>, InAs с  $(N_A - N_D) < 10^{17}$  см<sup>3</sup>, InSb<Cr> и CdSnAs<sub>2</sub><Cu> с коэффициентом заселенности акцепторной зоны  $0 \leq K_3 \leq 1$ . Проиллюстрируем полученные результаты на примере *p*-CdSnAs<sub>2</sub><Cu>. С увеличением давления наблюдается фазовый переход к прыжковой проводимости с переменной длиной прыжка как электронов зоны проводимости – локализация в ямах крупномасштабного флуктуационного потенциала, так и дырок акцепторной зоны. Эффективные подвижности  $\mu_{e,A} \sim \exp\{-(T_{0e,A}/T)^{1/4}\}$  до  $T=40 \div 50$  К, причем параметры  $T_{0e,A}$  с давлением  $P$  увеличивается от нуля к  $T_{0e} \rightarrow \infty$  и  $T_{0A}$  стремится к конечной величине, когда  $P \rightarrow \infty$ , в соответствии с барической зависимостью плотностей состояний на уровне Ферми электронов зоны проводимости  $g_e(\varepsilon_F) \rightarrow 0$  и дырок акцепторной зоны  $g_A(\varepsilon_F) \rightarrow g_A(\varepsilon_F)_\infty$ . На хвосте плотности состояний зоны проводимости можно выделить два участка, аппроксимируемых экспоненциальной зависимостью от энергии. У невозмущенного края зоны проводимости  $g_e$  резко на  $4 \div 5$  порядков убывает с увеличением расстояния от невозмущенного края зоны проводимости. Второй пологий участок зависимости  $g_e(\varepsilon)$  ниже уровня протекания можно аппроксимировать, как это принято делать в аморфных полупроводниках, степенной зависимостью:  $g_e(\varepsilon) \sim |\varepsilon - \varepsilon_A|^2$ , где энергия  $\varepsilon_A$ , при которой  $g_e(\varepsilon) \approx 0$  равняется  $-200$  мэВ (относительно невозмущенного края зоны проводимости) [1]. В связи с дискуссионным характером проблемы о знаке парциального по акцепторной зоне коэффициента Холла  $R_A$  уместно подчеркнуть, что независимо от степени заселенности акцепторной зоны по ней  $R_A > 0$ , а парциальная термоэдс  $\alpha_A > 0$ , когда  $K_3 > 0.5$  и  $\alpha_A < 0$ , когда  $K_3$  меньше 0.5 [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований. Грант № 02-02-17888.

- [1] М.И. Даунов, И.К. Камилов, В.А. Елизаров и др. Докл. РАН. **357** (1997) 612
- [2] M.I. Daunov, I.K. Kamilov, S.F. Gabibov. *Semicond. Sci. Technol.* **16** (2003) 511
- [3] M.I. Daunov, I.K. Kamilov, S.F. Gabibov et. al. *Phys. Stat. Sol.(b)*. **235** (2003) 297



## СИНТЕЗ СВЕРХПРОВОДЯЩИХ КУПРАТОВ СОСТАВА $\text{Sr}_{1-x}\text{A}_x\text{CuO}_2$ ( $\text{A} = \text{Li}, \text{Ca}, \text{Ba}, \text{Ln}; 0 < x < 1$ ) В УСЛОВИЯХ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ И ТЕМПЕРАТУР

Т.В. Дьячкова<sup>1</sup>, Н.И. Кадырова<sup>1</sup>, А.П. Тютюнник<sup>1</sup>, В.Г. Зубков<sup>1</sup>, В.И. Бобровский<sup>2</sup>,  
Ю.Г. Зайнулин<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург

<sup>2</sup>Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург

Фаза высокого давления оксида  $\text{SrCuO}_2$  представляет собой антиферромагнитный диэлектрик и является отправной при синтезе целого класса так называемых бесконечнослоевых (Infinite-layer – IL) высокотемпературных сверхпроводников состава  $\text{Sr}_{1-x}\text{A}_x\text{CuO}_2$  ( $\text{A} = \text{Ln}, \text{Ca}, \text{Ba}, \text{Li}$ ) с рекордными значениями температуры сверхпроводящего перехода ( $T_c \sim 40\text{--}100$  К). Эти соединения обладают наиболее простой среди слоистых купратов кристаллической структурой из чередующихся перовскитных слоев  $\text{CuO}_2$  разделенных слоями из атомов металлов и являются удобными модельными объектами для понимания механизма сверхпроводимости в медь–оксидной керамике, тем более что до сих пор нет окончательной ясности в этом вопросе.

Целью работы является синтез, структурная аттестация и изучение свойств фаз высокого давления состава  $\text{Sr}_{1-x}\text{A}_x\text{CuO}_2$  ( $\text{A} = \text{Li}, \text{Ca}, \text{Ba}, \text{Ln}; 0 < x < 1$ ).

Термобарический синтез проводили с использованием камеры высокого давления типа “тороид” в интервале давлений  $P = 1\text{--}9$  ГПа и температур  $T = 700\text{--}1500^\circ\text{C}$ .

В этих условиях получены IL-фазы высокого давления состава  $\text{Sr}_{1-x}\text{Li}_x\text{CuO}_2$  ( $0 < x < 0.15$ ),  $\text{Sr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{CuO}_2$  ( $0 < x < 1$ ),  $\text{Sr}_{0.49}\text{Ca}_{0.45}\text{Ba}_{0.05}\text{CuO}_2$  и  $\text{Sr}_{1-x}\text{Ln}_x\text{CuO}_2$  ( $\text{Ln} = \text{La}, \text{Nd}; 0 < x < 0.13$ ).

С помощью методов рентгенографии проведена аттестация фаз высокого давления, образующихся в системе  $\text{Sr}\text{--}\text{A}\text{--}\text{Cu}\text{--}\text{O}$ , определены параметры кристаллической решетки IL-фаз. Установлены концентрационные зависимости периодов идентичности от содержания металлов в сложных оксидах  $\text{Sr}_{1-x}\text{A}_x\text{CuO}_2$ .

Проанализированы особенности термобарического синтеза бесконечно слоевых фаз в зависимости от состава исходных компонентов. Изучены закономерности формирования твердых растворов в зависимости от величины давления, температуры и времени протекания процесса. Определены оптимальные условия синтеза и области существования IL-фаз в системах  $\text{Sr}\text{--}\text{A}\text{--}\text{Cu}\text{--}\text{O}$  ( $\text{A} = \text{Li}, \text{Ca}, \text{Ba}, \text{Ln}$ ). Исследована устойчивость полученных препаратов на воздухе.

Измерены магнитные характеристики полученных фаз.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 02-03-32380.

## СИНТЕЗ И ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ НАНОПОРОШКА $C_3N_4$

А.А. Антанович<sup>1</sup>, В.А. Давыдов<sup>1</sup>, А.В. Рахманина<sup>1</sup>, В.П. Филоненко<sup>1</sup>, В.Н. Хабашеску<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк*

<sup>2</sup>*Университет им. У.М. Райса, Хьюстон, США*

Методом высокотемпературной поликонденсации в стальном реакторе, заполненном пористым субстратом, из  $Li_3N$  и  $C_3N_3Cl_3$  впервые получен карбонитрид  $C_3N_4$  сферической формы с размерами частиц от 20 нм [1,2].

При использовании комбинации различных методов анализа установлено, что сферы являются полыми, а их оболочка представляет собой многослойную структуру  $sp^2$ -связанных атомов азота и углерода, образующих искривленные слои графитоподобного карбонитрида с межплоскостным расстоянием 3.415 Å. Содержание азота в материале составило 58 %, а углерода – 31 % по массе (расчетное содержание для стехиометрии  $C_3N_4$  – 61 и 39 %).

Данный карбонитридный порошок использовался в качестве исходного материала в серии экспериментов при высоких давлениях и температурах как в чистом виде, так и в качестве компонента смесей с нанопорошками алмаза и нитрида бора. Эксперименты проводили в камерах тороид в интервале давлений 7.0–12.0 ГПа, температур 400–1000°C и времени выдержки от 5 до 15 минут.

Дифрактограммы исходного порошка характеризуются широким максимумом в диапазоне углов  $2\theta$  от 20 до 30°, что свидетельствует о преимущественно аморфном характере структуры. По результатам рентгенографического анализа было установлено, что после термобарического воздействия сохранить стехиометрию, близкую к  $C_3N_4$ , удается при температурах не выше 600°C. Максимальная степень кристалличности таких образцов не превышала 90 %, причем доминирующей являлась графитоподобная фаза. Наличие в ней наноразмерных хорошо ограненных включений кубической фазы с параметром ячейки 5.35–5.4 Å удалось установить только с помощью трансмиссионной микроскопии.

Проведен сравнительный анализ особенностей кристаллизации при высоких давлениях аморфного карбонитрида без добавок и в составе смесей с наноалмазами и нанопорошками нитрида бора.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (грант 02-03-32699).

[1] Дж.Л. Циммерман, Р. Уильямс, В.Н. Хабашеску, Дж.Л. Маргрейв. *Изв. АН. Сер. Хим.* **11** (2001) 1930

[2] J.L. Zimmerman, R. Williams, V.N. Khabashesku, J.L. Margrave. *Nano Letters.* **1** (2001) 743

## ФАЗОВЫЙ ПЕРЕХОД В БЕТА-ГЛИЦИНЕ ПРИ 0.75 ГПа

С.В. Горяйнов<sup>1,2</sup>, Е.Н. Колесник<sup>1</sup>, Е.В. Болдырева<sup>1,3</sup>

<sup>1</sup>Научно-образовательный центр “Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии”, Новосибирский Государственный Университет, Новосибирск

<sup>2</sup>Институт минералогии и петрографии СО РАН, Новосибирск

<sup>3</sup>Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск

Глицин  $\text{NH}_3^+\text{CH}_2\text{COO}^-$  – одна из важнейших аминокислот – существует при н.у. в безводном кристаллическом состоянии в трех формах:  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ . Модификации  $\alpha$  и  $\gamma$  стабильны, а  $\beta$  – неустойчива на воздухе. Поведение этих форм под давлением начали исследовать в последнее время.  $\alpha$ -Глицин не имеет фазовых переходов (ФП) при высоких давлениях до 23 ГПа [1,2],  $\beta$ -глицин ранее не исследовался из-за трудности выращивания кристаллов и его низкой стабильности, а  $\gamma$ -глицин, как показано методом синхротронной рентгеновской дифракции [3], имеет размытый ФП при  $\sim 3$  ГПа.

Используя методы комбинационного рассеяния (КР) и поляризационной микроскопии, мы исследовали поведение  $\beta$ -формы при высоких давлениях до 7.6 ГПа. Для создания гидростатического давления в аппарате с алмазными наковальнями использована смесь метанол/этанол 4/1. Давление определено по смещению  $R_1$ -полосы рубина с точностью  $\pm 0.03$  ГПа. Из игольчатых (вытянутых вдоль оси  $2_1$ )  $\beta$ -кристаллов оптического качества, что исключало примесь других фаз, были отрезаны образцы размером  $\sim 0.1 \times 0.05 \times 0.1$  мм. Спектры КР записаны спектрометром DILOR OMARS 89 с многоканальным детектором LN/CCD1100 PB (Princeton Ins.) и ночь-фильтром.

При давлении 0.75 ГПа впервые обнаружен фазовый переход в  $\beta$ -глицине, который слабо проявляется в КР спектрах и наблюдается визуально под микроскопом только при медленном прохождении ФП. После каждого прохождения перехода возникают следы – новые трещины перпендикулярно выделенной оси кристалла. При ФП возникает быстродвигающаяся перпендикулярно оси кристалла волна с измененным показателем преломления. После образования трещин образец поблочно переходит в новую фазу в течение 0.5–5 сек (в отдельном блоке за 0.05–0.5 сек). Частоты полос КР в зависимости от  $P$  испытывают небольшие скачки или изломы при 0.75 ГПа, что свидетельствует о фазовом переходе 1-ого рода, близком ко 2-ому. Переход обратим, почти без гистерезиса ( $< 0.05$  ГПа). Вероятно, что симметрия фазы не меняется при ФП. Наиболее отчетливые изменения КР спектра при ФП наблюдались в диапазоне  $150\text{--}1200\text{ см}^{-1}$ , особенно для двух полос, C–C stretch и  $\text{CH}_2$  rock около  $900\text{ см}^{-1}$ . При высоком давлении (5–7.6 ГПа) некоторые частоты КР полос фазы 2 сдвигаются с давлением нелинейно, что может говорить о поворотных деформациях молекул.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты 02-03-33358 и 02-05-65313), программы BRNE (грант NO-008-X1), Минобразования РФ (грант Ч0069), программы “Университеты России” (грант ур.05.01.021), Фонда Содействия Отечественной Науке (ЕВБ).

[1] С.Murli, S.M. Sharma, S. Karmakar, S.K. Sikka, *Physica B* **339** (2003) 23

[2] E.V. Boldyreva, H. Ahsbahs, H.-P. Weber, *Z. Kristallogr.* **218** (2003) 231

[3] Е. В. Болдырева, С.Н. Ивашевская, Г. Сова, Г. Ахсбахс, Г.-П. Вебер, *Доклады РАН*, **396**(3) (2004)

## СКАЧОК ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЩЕЛИ В $GdFe_3(VO_3)_4$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

А.Г. Гаврилюк<sup>1</sup>, С.Г. Овчинников<sup>2</sup>, С.А. Харламова<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк*

<sup>2</sup>*Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского Отделения РАН, г. Красноярск*

Борат  $GdFe_3(VO_3)_4$  является магнитным диэлектриком, прозрачным в видимом диапазоне. Это антиферромагнетик с температурой Нееля  $T_N=38$  К [1]. С другой стороны, такие кристаллы наряду с высокотемпературными сверхпроводящими купратами и манганитами с колоссальным магнетосопротивлением являются примером систем с сильными электронными корреляциями (СЭК). СЭК определяют их электронную структуру, магнитные, оптические и электрические свойства. С теоретической точки зрения, проблема СЭК является фундаментальной проблемой современной физики конденсированного состояния, не нашедшей адекватного решения в настоящее время. В работе [2] представлены результаты экспериментальных исследований оптических свойств  $GdFe_3(VO_3)_4$  при нормальном давлении, где было обнаружено сходство спектров оптического поглощения  $GdFe_3(VO_3)_4$  при нормальном давлении со спектрами  $FeVO_3$ , многоэлектронная модель зонной структуры которого с учетом сильных электронных корреляций была сформулирована в [3]. Авторами работы [2] проведен анализ зонной структуры  $GdFe_3(VO_3)_4$  в рамках этой модели, учтены  $d$ -орбитали и сильные электронные корреляции  $d$ -электронов. Установлено, что  $GdFe_3(VO_3)_4$  по типу относится к диэлектрикам с переносом заряда.

В настоящей работе представляются результаты экспериментальных исследований оптических свойств  $GdFe_3(VO_3)_4$  при высоком давлении. На основании многоэлектронной модели зонной структуры с учетом сильных электронных корреляций в  $GdFe_3(VO_3)_4$  под действием высокого давления предсказаны: кроссовер высокоспинового и низкоспинового состояний иона  $Fe^{3+}$ , коллапс магнитного момента, ослабление кулоновских корреляций, а также переход диэлектрик – полупроводник.

Представлены экспериментальные спектры оптического поглощения, которые доказывают вышеизложенные предсказания, а именно, в  $GdFe_3(VO_3)_4$  под действием высокого давления обнаружен скачок энергетической щели при давлении 43 ГПа [2].

- [1] A.D. Balaev, L.N. Bezmaternykh, I.A. Gudim, S.A. Kharlamova, S.G. Ovchinnikov, V.L. Temerov. *JMMM*, **258-259C** (2003) 532
- [2] О. А. Баюков, Л. Н. Безматерных, А. М. Гаврилюк, В. Н. Заблуда, И. С. Любутин, С. Г. Овчинников, А. М. Поцелуйко, М. Томас, С. А. Харламова. *Препринт ИФ СОРАН, № 827* (2004) p. 26
- [3] С.Г. Овчинников. *Письма в ЖЭТФ* **77** (2003) 808

# ОБРАЗОВАНИЕ РАНЕЕ НЕИЗВЕСТНОЙ ПОЛИМОРФНОЙ МОДИФИКАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ГЛИЦИНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ

Е.В. Болдырева<sup>1,2</sup>, С.Н. Ивашевская<sup>2,3</sup>, Г. Сова<sup>4</sup>, Г. Ахсбахс<sup>4</sup>, Г.-П. Вебер<sup>5,6</sup>

<sup>1</sup>*Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, Новосибирск*

<sup>2</sup>*Научно-образовательный центр "Молекулярный дизайн и экологически безопасные технологии", Новосибирский государственный университет*

<sup>3</sup>*Институт геологии КарНЦ РАН, Петрозаводск*

<sup>4</sup>*Institute of Mineralogy, Philipps-Universitaet, Marburg/Lahn, Germany*

<sup>5</sup>*SNBL ESRF, PO Box 220, F-38043 Grenoble Cedex, France*

<sup>6</sup>*Institut de Cristallographie, Universite de Lausanne, Lausanne, France*

Исследование влияния давления на молекулярные кристаллы органических соединений важно для прогнозирования поведения лекарственных препаратов, материалов и устройств на основе молекулярных кристаллов в условиях высоких давлений и при других механических воздействиях, а также для совершенствования теоретических моделей, используемых для предсказания кристаллических структур и молекулярных конформаций в зависимости от условий. Одной из наиболее актуальных задач является поиск новых полиморфных модификаций – фаз высокого давления.

Нами выполнено исследование влияния гидростатического давления на кристаллическую гамма-модификацию глицина ( $P3_1$ ). Использовался аппарат с алмазными наковальнями типа Меррилла–Бэссетта. В качестве среды, передающей давление, взяли специально осушенную смесь этанола и метанола. Порошковый рентгенодифракционный эксперимент был проведен с использованием синхротронного излучения Европейского центра синхротронных исследований в Гренобле. Индексирование дифракционных спектров осуществлено при помощи программы TREOR90 [1]. Вычитание фона, расшифровка структуры методом систематического поиска и ее уточнение методом Ритвельда с наложением ограничений на длины и углы связей были проведены при помощи пакета программ MR1A [2]. Атомы водорода были помещены в геометрически рассчитанные позиции.

Впервые был обнаружен фазовый переход первого рода, начинающийся при гидростатическом давлении 2.73 ГПа и все еще не полностью заверченный при 7.85 ГПа. Структура новой фазы высокого давления описывается пространственной группой симметрии  $Pn$  ( $R_p = 0.18$ ,  $R_b = 0.18$ ,  $R_w = 0.17$ ):  $a = 5.379(1)$  Å,  $b = 5.557(1)$  Å,  $c = 4.780(1)$  Å,  $\beta = 118.25(1)^\circ$ ,  $V = 125.86(4)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 2$ . В фазе высокого давления цвиттерионы глицина связаны водородными связями NH...O в слое, которые попарно связываются также водородными связями NH...O между собой. Строение индивидуальных слоев сходно со строением слоев в ранее известных альфа- ( $P2_1/n$ ) и бета- ( $P2_1$ ) модификациях, но их наложение друг на друга существенно иное. Вызываемое давлением полиморфное превращение из гамма-модификации глицина в новую фазу можно сопоставить с изменением вторичной структуры биополимера, когда вместо спиралей образуются складки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 02-03-33358), программы BRNE (грант NO-008-X1), Минобразования (грант Ч0069, грант ур.05.01.021).

[1] P.-E. Werner, L. Eriksson, M. Westdahl, *J. Appl. Cryst.* **18** (1985) 367

[2] V.B. Zlokazov, V.V. Chernyshev, *J. Appl. Cryst.* **25** (1992) 447

## ГИДРОСТАТИЧЕСКОЕ СЖАТИЕ МОНОКРИСТАЛЛОВ $\text{BaBPO}_5$ И $\text{CeBSiO}_5$

С.С. Казанцев<sup>1</sup>, Б.А. Максимов<sup>1</sup>, V. Dmitriev<sup>2</sup>, Н.-Р. Weber<sup>2</sup>, Д.Ю. Пушаровский<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва

<sup>2</sup>SNBL at ESRF, Grenoble, France

<sup>3</sup>МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва

Исследовано влияние гидростатических давлений на сжимаемость монокристаллов стиллвеллита  $\text{CeBSiO}_5$  [1] и его структурного аналога – синтетического  $\text{BaBPO}_5$  [2]. Измерения проведены на автодифрактометре KUMA6-CCD ( $\lambda = 0,8000 \text{ \AA}$ ), линия BM01 (SNBL, ESRF, Гренобль, Франция). Давления в диапазоне до 10 ГПа создавались в модифицированной камере типа Меррилла–Бассетта (ETHZ, Цюрих, Швейцария). В качестве гидростатической среды использовали смесь спиртов, давление измеряли по внутреннему эталону – кристаллу рубина.

Для монокристалла  $\text{BaBPO}_5$  ( $P3_22$ ,  $a = 7.114(1) \text{ \AA}$ ,  $c = 6.993(1) \text{ \AA}$ ,  $V = 306.49 \text{ \AA}^3$ ,  $Z = 3$ ) размером  $40 \times 80 \times 30 \text{ \mu m}$  в диапазоне  $0,0001\text{--}8,7 \text{ ГПа}$  произведены измерения параметров элементарной ячейки в 13 точках по давлению. Для двух монокристаллов стиллвеллита  $\text{CeBSiO}_5$  ( $a = 6.843(3) \text{ \AA}$ ,  $c = 6.695(3) \text{ \AA}$ ,  $V = 271,6 \text{ \AA}^3$ ) размерами  $90 \times 60 \times 20 \text{ \mu m}$  и  $30 \times 40 \times 30 \text{ \mu m}$  в диапазонах  $0,4\text{--}5,07$  и  $1,05\text{--}9,85 \text{ ГПа}$  произведено соответственно 7 и 8 аналогичных измерений. В каждом случае измерение параметров элементарной ячейки дополнено набором интегральных интенсивностей, которые планируется использовать для уточнения кристаллической структуры образцов в условиях их гидростатического сжатия. Полученные значения  $K_0$  и  $K_0'$  составляют:  $K_0 = 78(8)$ ,  $K_0' = 6(3) \text{ ГПа}$  для  $\text{BaBPO}_5$  и  $K_0 = 135(9)$ ,  $K_0' = 7(2) \text{ ГПа}$  для стиллвеллита.

На рис. 1 и 2 представлена зависимость относительной сжимаемости параметров элементарных ячеек исследованных образцов от давления. Заметное расхождение в сжимаемости наблюдается с величин давления выше 4 ГПа. Подобные отличия в сжимаемости, а также большую анизотропию сжатия ячейки  $\text{BaBPO}_5$  можно объяснить большим объемом координационного полиэдра атомов Ва. В настоящее время ведется работа по расшифровке кристаллических структур исследованных образцов.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ, принятого к рассмотрению под № 04-05-64630 и Программы поддержки ведущих научных школ (НШ-1642.2003.2).

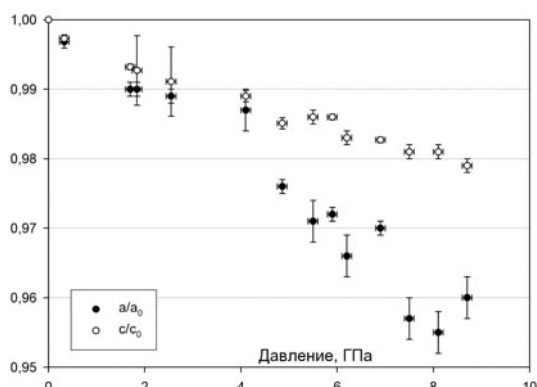


Рис. 1. Сжимаемость параметров элементарной ячейки  $\text{BaBPO}_5$

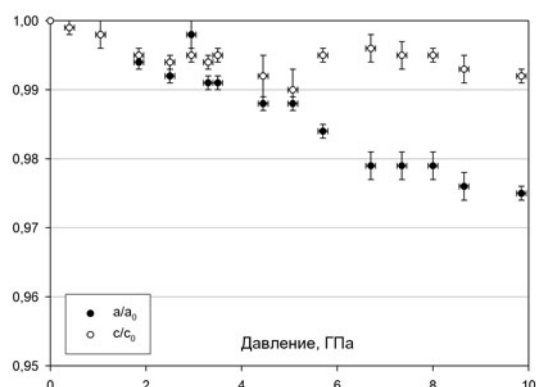


Рис. 2. Сжимаемость параметров элементарной ячейки  $\text{CeBSiO}_5$

[1] P.C. Burns, F.C. Hawthorne et al. *Can. Miner.* **31** (1993) 147-152

[2] D.Y. Pushcharovsky, E.R. Gobetchia et al. *J. Alloys Comp.* **339** (2002) 70-75

# ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ МЕХАНИЗМОВ РАЗРУШЕНИЯ И ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В ПРЕГРАДАХ ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ

В.А. Горельский, И.Е. Хорев, А.А. Рогова, Е.А. Минакова

*Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники, Томск*

Исследования повреждения пластин с помощью быстролетящего тела показали, что с изменением условий их взаимодействия картина разрушения существенно меняется. Результаты экспериментов свидетельствуют, что при взаимодействии цилиндрических тел с пластинами, толщина которых не превышает одного - двух диаметров ударника, пластина разрушается в результате выпрессовки из нее диска [1]. Численное описание перфорации пластин выполняли методом конечных элементов [2]. Материал взаимодействующих тел моделируется сжимаемой упругопластической средой, поведение которой при динамических нагрузках характеризуется модулем сдвига, динамическим пределом текучести, вязкостью и константами кинетической модели разрушения, описывающей развитие микрповреждений и константами фазовых превращений. В момент времени 4 мкс наблюдается три очага разрушения – два вблизи лицевой поверхности и один вблизи тыльной. Разрушение вблизи лицевой поверхности, локализованное на оси симметрии, обусловлено взаимодействием волн разгрузки, исходящих с боковых поверхностей ударника. Однако при внедрении цилиндра этот очаг откольного разрушения подавляется уже к 15-й мкс. Второй очаг откольного разрушения на лицевой поверхности удален от оси симметрии на расстояние 1,5 радиуса ударника и достигает максимального развития к 8-й мкс. К этому времени радиус зоны разрушения вблизи тыльной поверхности составляет 1,3 радиуса ударника и начинает формироваться четвертый очаг откольного разрушения в центре пластины. К 24 мкс картина разрушения пластины принципиально отличается от наблюдавшейся в течение первых 10 мкс.

Таким образом, результаты выполненных исследований свидетельствуют о существенном вкладе откольного разрушения в процесс перфорации пластин. Установлено, что формирование отделяемого диска в верхней и нижней половинах пластины происходит по различным механизмам.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 03-01-00386).

- [1]. И.Е. Хорев, В.А. Горельский, Численное моделирование откольных разрушений при осесимметричном взаимодействии твердых тел. *Детонация: Материалы II Всесоюз. совещ. по детонации*. Черноголовка (1981) 149-152
- [2]. В.А. Горельский, И.Е. Хорев, Н.Т. Югов, Динамика трехмерного процесса несимметричного взаимодействия деформируемых тел с жесткой стенкой. *Прикл. механика и технич. физика* №4 (1985) 111

## ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ТВЕРДОГО РАСТВОРА $\text{Re}_{0.3}\text{Ir}_{0.7}$

И.В. Корольков<sup>1</sup>, Т.В. Дьячкова<sup>2</sup>, С.А. Громилов<sup>1</sup>,  
К.В. Юсенко<sup>1</sup>, С.В. Коренев<sup>1</sup>, А.П. Тютюнник<sup>2</sup>, Ю.Г. Зайнулин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт неорганической химии им. А.В. Николаева РАН, Новосибирск

<sup>2</sup>Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург

Изучены фазовые превращения гексагональной плотноупакованной фазы  $\text{Re}_{0.3}\text{Ir}_{0.7}$  ( $a = 2.736(2) \text{ \AA}$ ,  $c = 4.390(3) \text{ \AA}$ ) при высоком давлении и температуре. Фаза была получена восстановительным термолизом комплекса  $[\text{Ir}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}][\text{IrCl}_6]_{0.4}[\text{ReCl}_6]_{0.6}$  в атмосфере водорода [1]. Поскольку состав этой фазы соответствует границе между двухфазной областью ( $\alpha+\beta$ ) и областью кубических фаз ( $\alpha$ ), то представлялось интересным проследить за ее возможными фазовыми превращениями при одновременном воздействии давления и температуры.

Термобарическую обработку  $\beta\text{-Re}_{0.3}\text{Ir}_{0.7}$  проводили в камере высокого давления типа тороид. Образец, помещенный в графитовый нагреватель, подвергали сжатию до необходимого давления, а затем повышали температуру. После выдержки в заданных условиях нагрев отключали, снимали давление и извлекали образец из камеры. Таким образом, можно говорить о частичной закалке образца.

По данным РФА при давлении 9 ГПа и температуре 2000°C образуется метастабильная рентгеноаморфная фаза, которая при хранении в обычных условиях в течение суток рекристаллизуется до металлических иридия и рения. Обработка при  $P = 1 \text{ ГПа}$  и  $T = 2000^\circ\text{C}$  приводит к фазовому переходу гексагональной модификации  $\text{Re}_{0.3}\text{Ir}_{0.7}$  в кубическую гранцентрированную с параметром элементарной ячейки  $a = 3.846(2) \text{ \AA}$ . Для исходной фазы объем, приходящийся на один атом, составляет  $V/Z = 14.23 \text{ \AA}^3$ , а плотность  $22.22 \text{ г/см}^3$ . Для конечной фазы  $\text{Re}_{0.3}\text{Ir}_{0.7}$   $V/Z = 14.22 \text{ \AA}^3$  и  $D_x = 22.23 \text{ г/см}^3$ .

В работе [2] была описана ГЦК фаза состава  $\text{Ir}_{0.72}\text{Re}_{0.28}$  с гораздо меньшей характеристикой  $V/Z$  и аномально большой плотностью  $26.02 \text{ г/см}^3$ . Авторы работы установили, что твердость слитка почти в 2 раза больше, чем у чистого Ir. Повышение плотности и увеличение твердости могут быть объяснены образованием интерметаллида типа  $\text{Cu}_3\text{Au}$ , так как соотношение металлов в  $\text{Ir}_{0.72}\text{Re}_{0.28}$  близко к 3 : 1. Кроме того, эта фаза была получена методом литья в дуговой печи с вольфрамовым нерасходуемым электродом. Отжиг образцов проводили в эвакуированных кварцевых ампулах при 1000°C в течение 300 час или в вакууме при 2000°C в течение часа. Далее следовало закачивание в воду. Согласно нашим расчетам, относительная интенсивность сверхструктурных рефлексов при образовании интерметаллида не превышает 1%. при обычной съемке, поэтому авторы [2] могли их не заметить. Съемка с большим накоплением импульсов показала, что в нашем случае в результате фазового перехода получен неупорядоченный твердый раствор  $\text{Ir}_{0.7}\text{Re}_{0.3}$ .

[1] С.А. Громилов, С.В. Коренев, И.В. Корольков и др. *Журн. структурн. химии* **40**(3) (2004) в печати

[2] М.А. Тылкина, И.А. Цыганова, Е.М. Савицкий. *Журн. неорган. химии*. **7**(8) (1962) 1917



## УСТОЙЧИВОСТЬ АММОНИЙНОГО АНАЛЬЦИМА И НАТРОЛИТА ПРИ ДАВЛЕНИЯХ ДО 12 ГПа

А.Ю. Лихачева, С.В. Горяйнов

*Институт минералогии и петрографии СО РАН, Новосибирск*

Спецификой вхождения иона  $\text{NH}_4^+$  в структуру узкопористых цеолитов анальцима и натролита является образование водородных связей  $\text{N}-\text{H}\cdots\text{O}$  с каркасными атомами кислорода. Высокая чувствительность иона  $\text{NH}_4^+$  к геометрии локального окружения может приводить к искажению его конфигурации и перераспределению водородных связей с каркасом при деформациях структуры. Интересно изучить влияние вхождения иона  $\text{NH}_4^+$  на устойчивость анальцима и натролита – различных по топологии алюмосиликатов – при повышении давления. Эксперименты по сжатию  $\text{NH}_4$ -анальцима  $(\text{NH}_4)_{15.04}\text{Al}_{15.04}\text{Si}_{32.96}\text{O}_{96}$  и  $\text{NH}_4$ -натролита  $(\text{NH}_4)_{16.2}\text{Al}_{16.2}\text{Si}_{23.8}\text{O}_{80}$  проводили в камере высокого давления с алмазными наковальнями до 12 ГПа в непроникающей среде (глицерин). Давление определяли по люминесценции рубина.

В  $\text{NH}_4$ -анальциме при 1.5–1.8 ГПа наблюдается фазовый переход, сопровождаемый потемнением кристаллов в скрещенных николях. В этой области давлений зафиксирован переход в К-анальциме, где  $\text{K}^+$ , как и  $\text{NH}_4^+$ , занимает позиции воды W. Переход в К-анальциме отнесен к переходам смещения с вращением  $\text{TO}_4$ -тетраэдров и искажением четверных колец, составляющих базовый структурный элемент анальцима [1]. Дальнейшее повышение давления до 12 ГПа к видимым изменениям в кристаллах  $\text{NH}_4$ -анальцима не ведет, погасание сохраняется. При сбросе давления обратный переход четко не наблюдался, погасание и прозрачность кристаллов отвечали исходным.

В  $\text{NH}_4$ -натролите происходит фазовый переход, сопровождаемый потемнением и последующим просветлением кристаллов при 1.2–1.5 ГПа. До сих пор в минералах группы натролита при сжатии в непроникающих средах не наблюдалось переходов до 5 ГПа, а в водной среде переходы, происходящие при 0.8–1.5 ГПа, связаны с внедрением дополнительных молекул  $\text{H}_2\text{O}$  и деформацией структурных каналов [2]. В случае  $\text{NH}_4$ -натролита подобная деформация может сопровождаться только смещением ионов  $\text{NH}_4^+$  и перераспределением водородных связей с каркасом. Спектр КР  $\text{NH}_4$ -натролита содержит при нормальном давлении полосы 250, 310, 456, 530 и 600  $\text{cm}^{-1}$ , относящиеся к деформационным O–T–O колебаниям каркаса и колебаниям четверных колец [3]. Планируемое изучение КР спектров  $\text{NH}_4$ -натролита при высоких давлениях позволит прояснить характер наблюдаемого при 1.2–1.5 ГПа перехода. При повышении давления до 10 ГПа видимых изменений не происходило, при сбросе давления обратный переход наблюдался при 1 ГПа, погасание и прозрачность кристаллов сохранились.

Таким образом, присутствие иона  $\text{NH}_4^+$  в полостях анальцима и натролита стабилизирует их структуру до более высоких давлений (10–12 ГПа), чем молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  и катионы щелочных и щелочноземельных металлов. Для сравнения, в природном натролите необратимая аморфизация наступает при 9 ГПа [4].

- [1] С.В. Горяйнов, И.А. Белицкий и др. *Геол. и геофиз.* **41**(5) (2000) 696
- [2] Y. Lee, T. Vogt, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **124** (2002) 5466
- [3] S.V. Goryainov and M.B. Smirnov. *Eur. J. Mineral.* **13** (2001) 507
- [4] S.V. Goryainov and A.Yu. Likhacheva. *Abstr. 5<sup>th</sup> EMU School*, (2003) 12

## ПОДАВЛЕНИЕ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ В БОРАТЕ ЖЕЛЕЗА FeVO<sub>3</sub> ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

А.Г. Гаврилюк, И.А. Троян, С.Г. Овчинников<sup>1</sup>,  
И.С. Любутин<sup>2</sup>, В.А. Саркисян<sup>2</sup>

*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк, Московской обл.*

<sup>1</sup>*Институт физики им. Л.В.Киренского СО РАН, 660036 Красноярск, Россия*

<sup>2</sup>*Институт кристаллографии РАН, 119333, Москва, Ленинский пр-т, 59*

Зонная структура и электронные свойства Мотт–Хаббардовских диэлектриков, к которым принадлежит антиферромагнетик FeVO<sub>3</sub>, должны зависеть от давления в основном по двум причинам: (1) с ростом давления может увеличиваться ширина *d*-зоны из-за усиления интегралов межатомных перескоков электронов, и (2) вследствие изменения кристаллического поля. Для монооксидов FeO, MnO, CoO и NiO со структурой каменной соли теоретические расчеты в приближении локальной плотности (LDA) и обобщенного градиента (GGA) в обобщенной модели Стонера установили доминирующую роль уширения *d*-зоны, которое с ростом давления приводит к магнитному коллапсу и переходу диэлектрик-металл [1].

В настоящей работе экспериментально исследованы оптические, мессбауэровские и рентгеновские спектры, а также электросопротивление в борате железа FeVO<sub>3</sub> при воздействии высоких давлений. Эксперименты проводились в камерах с алмазными наковальнями в диапазоне давлений до 140 ГПа. В области давлений 46–49 ГПа обнаружены ряд фазовых переходов с изменением магнитной, кристаллической, электронной и спиновой структуры. Теоретически исследованы оптические спектры поглощения с учетом особенностей кристаллической структуры FeVO<sub>3</sub> и сильной *s-p* гибридизации бора и кислорода. В приближении обобщенного метода сильной связи предложен механизм подавления сильных электронных корреляций, который приводит к наблюдаемым в эксперименте магнитным, электронным и структурным фазовым переходам. Установлено, что при изменении межионных расстояний с ростом давления решающую роль при электронных переходах играет параметр кристаллического поля  $\Delta$ , тогда как эффект уширения *d*-зоны пренебрежимо мал. С ростом  $\Delta$  происходит кроссовер высокоспинового и низкоспинового состояний Fe<sup>3+</sup>, что объясняет коллапс магнитного момента. Кроме того, имеет место аналогичный кроссовер и для Fe<sup>2+</sup> и Fe<sup>4+</sup> конфигураций. В результате эффективный параметр Хаббарда  $U_{eff} = E_0(d^4) + E_0(d^6) - 2E_0(d^5)$ , являющийся мерой кулоновских корреляций, в фазе низкого давления определяется высокоспиновыми термами основных состояний  $d^4$ ,  $d^5$ ,  $d^6$ -конфигураций, а в фазе высокого давления – низкоспиновыми термами, что и приводит к скачкообразному уменьшению  $U_{eff}$  в точке перехода. На основе экспериментальных данных рассчитаны параметры теории и их зависимость от давления.

Работа поддерживается Российским Фондом Фундаментальных Исследований (проекты № 02-02-17364а и 03-02-16286а) и программой Отделения физических наук РАН «Сильно коррелированные электроны».

[1] R.E. Cohen, I.I. Mazin and D.G. Isaak, *Science* **275** (1997) 654

# ELECTRON CONCENTRATION AND PRESSURE INDUCED STRUCTURAL CHANGES IN ALLOYS $\text{In}_{1-x}\text{M}_x$ ( $\text{M} = \text{Cd}, \text{Sn}$ )

A.S. Mikhaylushkin<sup>1,2</sup>, S.I. Simak<sup>2</sup>, S. Lidin<sup>1</sup>, U. Häussermann<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Department of Inorganic Chemistry, Stockholm University,  
S-106 91 Stockholm, Sweden*

<sup>2</sup>*Condensed Matter Theory Group, Department of Physics,  
Uppsala University, Box 530, SE-751 21 Uppsala, Sweden*

Elemental indium adopts a simple but unique crystal structure deviating from the close-packed trend usually displayed by metallic elements. It features a body-centered tetragonal (*bct*) unit cell with the *c/a* axial ratio of  $\sim 1.52$ . Indium is situated at the borderline between metals and nonmetals in the periodic table and apparently its elemental *bct*-I structure is highly susceptible to changes in the electron concentration. In that respect the alloying of In with small amounts of the neighboring elements Cd and Sn has interesting consequences. As a first approximation this alloying has the effect of decreasing (for Cd) and increasing (for Sn) the valence electron concentration (VEC). A 4–5 at. % alloying with Cd results in a discontinuous change to the *fcc* structure [1]. Contrary, the alloying with Sn increases first the *bct c/a* axial ratio [2]. Then at 12–14 at. % Sn a structural change to a *bct* structure with  $c/a < \sqrt{2}$  occurs (*bct*-II phase) [3].  $\text{In}_{0.94}\text{Cd}_{0.06}$  transforms at 1.4 GPa from the *fcc* into the *bct*-I structure [4]. The latter structure is stable up to at least 30 GPa.

We investigated the electron concentration and the pressure-induced structural transitions in alloys  $\text{In}_{1-x}\text{Cd}_x$  ( $0 \leq x \leq 0.1$ ) and  $\text{In}_{1-x}\text{Sn}_x$  ( $0 \leq x \leq 0.2$ ) by means of first principles calculations. At ambient conditions, the structural sequence *fcc*  $\rightarrow$  *bct*-I  $\rightarrow$  *bct*-II is realized with increasing VEC. High pressure has the same effect as the increase of VEC. The stability ranges of the different phases are very well reproduced when considering the structure producing the lowest value of the density of states at the Fermi level at a particular VEC as most stable. As for elemental *bct*-I In, this originates from an optimisation of hybridisation of the *5s* and *5p* valence bands. We suggest an appropriate path for phase transition *bct*-I  $\rightarrow$  *bct*-II through the face-centered orthorhombic structure.

- [1] T. Heumann and B. Predel, *Z. Metallkd.* **50** (1959) 309; T. Heumann and B. Predel, *Z. Metallkd.* **53** (1962) 240; M.E. Straumanis, P.B. Rao, and W.J. James, *Z. Metallkd.* **62** (1971) 493
- [2] M. F. Merriam, *Phys. Rev. Lett.* **11** (1963) 321
- [3] T. Heumann and O. Alpaut, *J. Less-Common Met.* **6** (1964) 108
- [4] O. Degtyareva, V.F. Degtyareva, F. Porsch and W. Holzapfel, *J. Phys.: Condens. Matter* **13** (2001) 7295

**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ**  
 **$Cd_{1-x}Mn_xGeAs_2$  И  $Cd_{1-x}Gr_xGeAs_2$**   
**ПРИ ГИДРОСТАТИЧЕСКИХ ДАВЛЕНИЯХ ДО 9 ГПа**

А.Ю. Моллаев<sup>1</sup>, И.К. Камилов<sup>1</sup>, Р.К. Арсланов<sup>1</sup>, У.З. Залибеков<sup>1</sup>, С.Ф. Маренкин<sup>2</sup>,  
В.М. Новоторцев<sup>2</sup>, С.Г. Михайлов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики Дагестанского научного центра РАН, Махачкала*

<sup>2</sup>*Институт общей и неорганической химии РАН, Москва*

Измерены удельное электросопротивление и коэффициент Холла многокомпонентных соединений  $p$ - $Cd_{1-x}Mn_xGeAs_2$  (образец 1 с  $x = 0.06$  и образец 2 с  $x = 0.18$ ) и  $Cd_{1-x}Cr_xGeAs_2$  (образец 3 с  $x = 0.01$ ) в зависимости от давления до 9 ГПа в квазигидростатических камерах типа «Тороид» при комнатной температуре.

При подъёме давления в интервале  $P < 0.9$  ГПа удельное сопротивление  $\rho(P)$  образца 1 меняется слабо, что обусловлено тем, что слабый рост концентрации носителей с давлением компенсируется падением подвижности. Около  $P = 0.9$  ГПа удельное сопротивление резко, почти на 5 порядков падает, отмечая начало фазового перехода, который заканчивается около  $P = 1.6$  ГПа, где кривая  $\rho(P)$  выходит на насыщение. При разгрузке зависимость  $\rho(P)$  показывает гистерезис, обратный переход наблюдается при  $P = 0.6$  ГПа. Соответствующее поведение демонстрирует и барическая зависимость коэффициента Холла. В области  $P > 1.6$  ГПа концентрация носителей составляет  $\approx 10^{20} \text{ см}^{-3}$ , электропроводность  $\sigma \sim 3000 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$ , что подтверждает наличие металлической проводимости, следовательно, и фазового перехода полупроводник–металл.

Удельное сопротивление образца 2 изменяется слабо в интервале давлений  $P \leq 4.7$  ГПа, что обусловлено взаимной компенсацией изменения концентрации и подвижности носителей. Падение удельного сопротивления скачком почти на 3 порядка в интервале  $P = 4.7\text{--}5.5$  ГПа свидетельствует о фазовом переходе, а конечное значение  $\sigma = 2850 \text{ Ом}^{-1} \cdot \text{см}^{-1}$  указывает на металлизацию образца 2. Барическая зависимость коэффициента Холла для образца 2 имеет более сложный характер. На ней можно выделить 4 области: 1)  $P < 0.6$  ГПа – область примесной проводимости, когда коэффициент Холла растёт; 2)  $P = 0.6\text{--}1.9$  ГПа – область истощения носителей, коэффициент Холла не меняется; 3) область  $P = 1.9\text{--}4.7$  ГПа, где коэффициент Холла падает до 0 и вновь возрастает, что может быть связано с изменением сорта носителей; 4) область фазового перехода  $P = 4.7\text{--}5.5$  ГПа.

В образце 3 фазовый переход наблюдается при  $P = 4.3$  ГПа.

На основе теории формирования гетерофазных структур и методики [1] определены характеристические точки и параметры фазового перехода: точки фазового равновесия  $P_0$ , точки метастабильного равновесия  $P_{MP}$ , гистерезис термодинамический, гистерезис флуктуационный при подъёме и сбросе давления для всех исследованных образцов. Согласно модели [1] гетерофазная структура – это эффективная среда. Рассчитана динамика изменения исходной фазы  $C_1$  с давлением.

В заключение отметим, что  $p$ - $Cd_{1-x}Mn_xGeAs_2$  может быть использован в качестве датчика давления (репера) в диапазоне  $P = 1\text{--}4.3$  ГПа.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты №02-02-17888, №03-02-17677).

[1] А.Ю. Моллаев, Р.К. Арсланов, Л.А. Сайпулаева, С.Ф. Габитов, С.Ф. Маренкин. *ФТВД* 11(4) (2001) 61

## ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ДИАРСЕНИДЕ ЦИНКА ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ ДО 50 ГПа

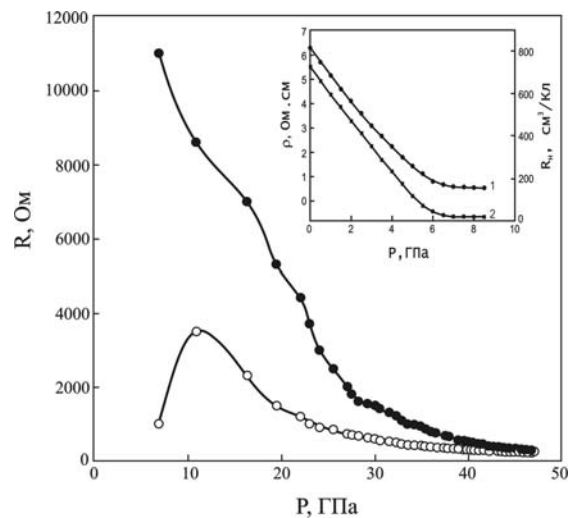
А.Ю. Моллаев<sup>1</sup>, Р.К. Арсланов<sup>1</sup>, Л.А. Сайпулаева<sup>1</sup>, А.Н. Бабушкин<sup>2</sup>, Т.С. Лях<sup>2</sup>,  
С.В. Татур<sup>2</sup>, С.Ф. Маренкин<sup>3</sup>, А.Ю. Вольфович<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Институт физики Дагестанского научного центра РАН, Махачкала

<sup>2</sup> Уральский государственный университет, Екатеринбург

<sup>3</sup> Институт общей и неорганической химии РАН, Москва

Измерено сопротивление, коэффициент Холла и термоэдс при давлениях до 50 ГПа. Измерения при гидростатических давлениях до  $P \approx 9$  ГПа проводились в аппарате высокого давления типа «Тороид», помещенном в соленоид  $H \leq 5$  кЭ. Монокристаллические образцы  $p$ -ZnAs<sub>2</sub> имели следующие параметры  $\rho = 6.3$  Ом·см  $|R_x| = 725$  см<sup>3</sup>·К<sup>-1</sup>. Измерения от  $P = 10 \div 50$  ГПа проводились в алмазных камерах высокого давления с наковальнями типа «закруглённый конус-плоскость» изготовленных из синтетических алмазов. Эти наковальни, являясь хорошим проводником ( $R \leq 10$  Ом), используются в качестве контактов к образцу. Диаметр образца  $d \leq 200$  мкм при толщине  $t < 20$  мкм. Из рис.1 (вставка) видно, что удельное сопротивление (кривая 1) с повышением давления до 7 ГПа падает на порядок и при  $P = 7 \div 9$  ГПа почти не меняется. Зависимость коэффициента Холла (кривая 2) аналогична, падает на два порядка до  $P < 7$  ГПа и затем выходит на насыщение. В области насыщения концентрация  $\approx 3 \cdot 10^{17}$  см<sup>-3</sup> и подвижность  $\approx 30$  см<sup>2</sup>/В<sup>-1</sup>·с<sup>-1</sup>. По всей вероятности, в области  $P = 7 \div 10$  Па имеет место растянутый фазовый переход. При дальнейшем увеличении давления сопротивление немонотонно уменьшается, на барической зависимости можно выделить три области с различными барическими коэффициентами сопротивления в интервалах  $P = 10 \div 25$  ГПа,  $P = 25 \div 30$  ГПа и  $P > 30$  ГПа. Из-за высоких значений сопротивления надёжные измерения термоэдс возможны при давлениях выше 25 ГПа. При давлениях  $P = 40$  ГПа концентрация носителей, оценённая из термоэдс  $\sim 2 \cdot 10^{21}$  см<sup>-3</sup>. Из полученных результатов следует, что при высоких давлениях,  $P = 25 \div 30$  ГПа, возникает новое фазовое состояние (фаза высокого давления), которая остаётся устойчивой при нормальном давлении, т.е. процесс является необратимым. При снижении давления после достижения его максимального значения барическая зависимость сопротивления не совпадает с барической зависимостью для исходного материала. Сопротивление образца становится меньше исходного. В последующих циклах увеличения и снижения давления сопротивление меняется с некоторым барическим гистерезисом, при этом его значение при нормальном давлении остается практически неизменным.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты №02-02-17888, №03-02-17677) и гранта BRNE EK-005-X1.

## ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ НА ОРИЕНТИРОВАННЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ *p*-CdSb ПРИ ВЫСОКИХ ГИДРОСТАТИЧЕСКИХ ДАВЛЕНИЯХ

А.Ю. Моллаев<sup>1</sup>, Р.К. Арсланов<sup>1</sup>, Р.Г. Джамамедов<sup>1</sup>, С.Ф. Маренкин<sup>2</sup>, С.А. Варнавский<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики Дагестанского научного центра РАН, Махачкала

<sup>2</sup>Институт общей и неорганической химии РАН, Москва

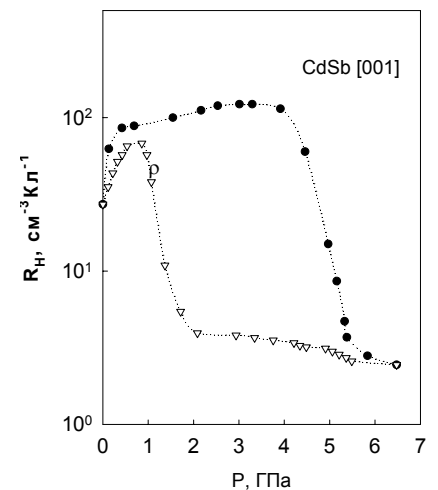
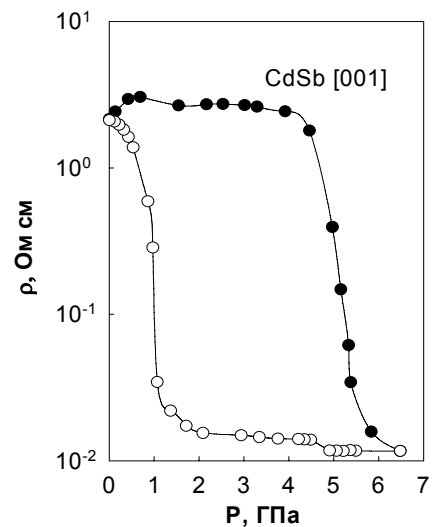
Антимонид кадмия относится к соединениям  $A^{II}B^V$  и кристаллизуется в орторомбическую структуру  $D_{2h}^{15}$ , имеющую сильную анизотропию механических и электрических свойств. В дополнение к ранее проведенным исследованиям [1] представлялось интересным измерить электрические свойства монокристаллов *p*-CdSb в области фазового перехода на образцах, вырезанных по разным кристаллографическим направлениям. Измерения проводились в аппарате высокого давления типа «Тороид» при гидростатических давлениях  $P \leq 7$  ГПа в области комнатных температур на двух образцах антимонида кадмия, ориентированных по кристаллографическим направлениям [001] (образец 1) и [010] (образец 2). Образцы 1 и 2 при атмосферном давлении имели следующие параметры:  $\rho = 2.1$  Ом·см,  $|R_H| = 27.2$  см<sup>3</sup>/Кл и  $\rho = 1.5$  Ом·см,  $|R_H| = 92.4$  см<sup>3</sup>/Кл, соответственно, (коэффициент Холла измерялся при  $H = 5$  кЭ). На рисунке приведены барические зависимости удельного электросопротивления  $\rho(P)$  и коэффициента Холла  $|R_H|(P)$  для образца 1 при подъеме (черные точки) и сбросе (светлые точки) давления. Из рисунка видно, что на барических зависимостях при  $P = 4.0$  ГПа при подъеме давления и при  $P = 2$  ГПа при сбросе давления наблюдается фазовый переход. Процесс проходит с большим гистерезисом и является обратимым, начальные значения удельного электросопротивления и коэффициента Холла до приложения давления и после его снятия совпадают. Поведение образца 2 под давлением аналогично, хотя вид барических кривых несколько отличается. На основе этих экспериментальных данных, теории поведения гетерофазных структур при высоких давлениях [2] и методологии, предложенной в работе [3], рассчитаны некоторые точки и параметры фазового перехода: точки фазового и метастабильного равновесия, гистерезисы термодинамический и флуктуационный, а также динамика изменения фазового состава исходной фазы I с давлением.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты № 02-02-17888 и № 03-02-17677).

[1] И.Т. Белаш, В.Ф. Дегтярева, Е.Г. Понятовский, В.И. Ращупкин. *ФТТ* **29**(6) (1987) 1788

[2] А.Л. Ройтбурд. *УФН*. **113**(1) (1974) 69

[3] А.Ю. Моллаев, Р.К. Арсланов, Р.И. Ахмедов, Л.А. Сайпулаева. *ФТВД*. **4**(3–4) (1994) 66



# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТЕМПЕРАТУРНЫХ И КОНЦЕНТРАЦИОННЫХ ПОЛЕЙ ПРИ ВЫРАЩИВАНИИ МОНОКРИСТАЛЛОВ АЛМАЗА РАЗЛИЧНОГО ГАБИТУСА

С. Н. Шевчук, А. А. Будяк, С. А. Ивахненко

*Институт сверхтвердых материалов им. В. Н. Бакуля НАНУ, Киев*

Выращивание монокристаллов алмаза методом температурного градиента в области термодинамической стабильности с применением металлов–растворителей является раствор–расплавной кристаллизацией. Для полного описания этого процесса необходимо знание характеристик растворителя, определяющих растворимость в нем веществ, являющихся источником для кристаллизации, диаграммы состояния, концентрации и пересыщения раствора, скорости роста, режимов кристаллизации.

Важнейшим фактором, определяющим процесс роста кристаллов алмаза, является величина температурного градиента, которая определяет распределение углерода в растворителе. Получение качественных кристаллов алмаза возможно при 20–30-градусном перепаде температуры между зоной расположения источника углерода и местом расположения затравочного кристалла, что соответствует значениям  $\text{grad } \bar{T} \approx 5\text{--}8$  град/мм. При таком перепаде температуры максимальная скорость роста структурно совершенных алмазов составляет около 3–5 мг/ч. Высокие значения температурного градиента приводят к спонтанному зародышеобразованию и высоким скоростям роста, при которых происходит захват включений в виде материала ростовой среды и рост кристаллов со значительными дефектами. Распределение температуры в ростовом объеме оказывает существенное влияние на кинетику роста отдельных граней кристаллов алмаза и степень развития простых форм  $\{111\}$ ,  $\{100\}$ ,  $\{110\}$  и  $\{311\}$ , определяет, по сути, габитус выращенного кристалла.

Экспериментальное определение температуры в реакционной ячейке непосредственно в процессе выращивания трудоемко и возможно лишь для ограниченного круга задач, кроме того, наличие измерительных термодпар в реакционной ячейке искажает ее температурное поле. В связи с этим нами был использован метод конечных разностей [1], который позволяет расчетными методами определить распределение температуры и концентрации углерода в реакционной ячейке при выращивании монокристаллов алмаза.

С помощью метода конечных разностей получены модели, которые иллюстрируют распределение температурных полей, а также распределение углерода в ростовой ячейке при выращивании монокристаллов алмаза, имеющих кубический, кубооктаэдрический и октаэдрический габитус. Полученная таким образом информация позволяет судить о значении и направлении осевых и радиальных градиентов температуры в ростовом объеме, а также о переносе углерода из объема растворителя к граням растущего кристалла и проследить их изменение в процессе увеличения размера кристалла. Кроме этого, рассмотрена возможность изменения значений осевых и радиальных градиентов температуры и переноса углерода к затравочному кристаллу путем изменения схемы нагрева и конфигурации резистивной цепи.

[1] А.А. Будяк, С.А. Ивахненко. *Сверхтвердые материалы*. 4 (1990) 11

## ГРАДИЕНТ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ОРТОРОМБИЧЕСКОЙ ФАЗЕ ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ $\text{HfO}_2$

А.В. Цвященко<sup>1</sup>, Л.Н. Фомичева<sup>1</sup>, Е.Н. Ширани<sup>1</sup>, Д.В. Философов<sup>2</sup>,  
А.В. Саламатин<sup>2</sup>, О.И. Кочетов<sup>2</sup>, В.А. Бруданин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики высоких давлений РАН, Троицк*

<sup>2</sup>*Объединенный Институт ядерных исследований, Дубна*

В нормальных условиях устойчива моноклинная модификация оксида гафния. Превращение моноклинной фазы в тетрагональную происходит при температуре  $\sim 1900^\circ$  и в кубическую модификацию при нагревании чистого  $\text{HfO}_2$  выше  $2700^\circ$  [1]. Под действием высокого давления в оксиде гафния обнаружена ромбическая фаза [2], а фазовые переходы, индуцированные высоким давлением, представлены в работе [3].

Для исследования электронных и структурных свойств фаз высокого давления образцы  $\text{HfO}_2$  были приготовлены при давлении 8.0 ГПа и при трех температурах в камере высокого давления [4]:  $850^\circ\text{C}$  (образец 1),  $1033^\circ\text{C}$  (образец 2) и  $1195^\circ\text{C}$  (образец 3) с добавлением менее 1 вес. % обогащенного  $^{181}\text{HfO}_2$ . Измерения градиента электрического поля (ГЭП) в положениях Hf проводились методом возмущенных угловых корреляций (ВУК).

Результаты исследований ГЭП при комнатной температуре и данные рентгеноструктурного анализа показали, что образец 1 является двухфазным, в нем при комнатной температуре сосуществуют моноклинная и орторомбическая фазы [3]. Значение ГЭП,  $V_{zz} = (13.2 \pm 0.5) \cdot 10^{17} \text{ В} \cdot \text{см}^{-2}$ , типичное для моноклинной фазы  $\text{HfO}_2$  [5], приблизительно в 2.67 раза меньше, чем для орторомбической фазы,  $V_{zz} = (35.3 \pm 0.5) \cdot 10^{17} \text{ В} \cdot \text{см}^{-2}$ , из-за увеличения плотности и координационного числа катионов [5]. Образцы 2 и 3 были однофазными, с моноклинной структурой и типичным для моноклинной фазы значением ГЭП. Тетрагональная фаза, которая согласно фазовой диаграмме  $\text{HfO}_2$  [2] должна была присутствовать в образцах 2 и 3, оказалась неустойчивой и полностью перешла в моноклинную фазу при нормальных условиях.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-02-16061).

- [1] А.Г. Богданов, В.С. Руденко, Л.П. Макаров, *Докл. АН СССР* **160**(5) (1965)
- [2] Н.А. Бенделиани, С.В. Попова, Л.Ф. Верещагин, *Геохимия* №6 (1967) 677
- [3] J.M. Leger et al., *Phys. Rev.* В **48** (1993) 93
- [4] A.V. Tsvyashchenko, *J. Less-Common Metals* **99** (1984) L9
- [5] J. Luthin, K.P. Lieb et al., *Phys. Rev.* В **57** (1998) 15272



## КАВИТАЦИОННОЕ ДАВЛЕНИЕ КАК ФАКТОР УПЛОТНЕНИЯ ФУЛЛЕРИТА C<sub>60</sub> ПРИ ЕГО ОСАЖДЕНИИ ИЗ РАСТВОРА

Ю.М. Шульга<sup>1</sup>, В.М. Мартыненко<sup>1</sup>, С.А. Баскаков<sup>1</sup>, В.И. Петин<sup>1</sup>, Д.В. Щур<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка

<sup>2</sup>Институт проблем материаловедения НАНУ, Киев

Ультразвуковое облучение используют для ускорения растворения фуллеритов. Эффект ультразвука связывают с образованием в облучаемой жидкости кавитационных пузырьков, давление при схлопывании которых доходит до тысячи атмосфер.

Мы изучили влияние ультразвука (15 кГц) на процесс осаждения фуллерита из раствора. Осаждение можно проводить двумя способами: 1) испаряя растворитель и 2) добавляя осадитель – вещество, которое растворяет растворитель, но не растворяет фуллерен. Первый способ известен давно (см., например, обзор [1]), а второй описан недавно [2,3]. В сообщении представлены результаты исследований структуры фуллерита (твёрдого фуллерена), полученного вторым способом.

Фуллерен C<sub>60</sub> в растворах существует в основном в виде кластеров [1], которые в свою очередь образуют неустойчивые фрактальные агрегаты. Казалось, ультразвуковое облучение ненасыщенного раствора должно разбивать эти агрегаты, увеличивая число центров последующей кристаллизации и, следовательно, вероятность формирования аморфного фуллерита. Однако под воздействием ультразвука в ходе пересыщения фуллерен хорошо кристаллизуется, и параметр ГЦК решетки образовавшегося фуллерита заметно меньше такового для образца, осаждённого без облучения ультразвуком.

В Таблице представлены результаты анализа порошковых дифрактограмм образцов C<sub>60</sub>, осажденных изопропанолом из трёх разных растворов. Видно, что независимо от вида исходного растворителя, параметр ГЦК решетки осаждённого фуллерита заметно уменьшается, если его кристаллизация осуществляется в ультразвуковом поле. В то же время влияния ультразвука на размер осажденных кристаллитов не обнаружено.

**Таблица.** Увеличение параметра ГЦК решетки исследуемых фуллеритов C<sub>60</sub> ( $\Delta a_0$ ) по сравнению фуллеритом, полученным вакуумной сублимацией ( $a_0 = 14,14 \text{ \AA}$ ), а также размер кристаллитов в направлении, перпендикулярном плоскости 220 ( $D_{220}$ ).

Образец	Ультразвук	Растворитель	$\Delta a_0$ (Å)	$D_{220}$ (nm)
1	–	толуол	0,12	40
2	+	толуол	0,05	32
3	–	хлорбензол	0,13	27
4	+	хлорбензол	0,05	39
5	–	1,2-дихлорбензол	0,14	70
6	+	1,2-дихлорбензол	0,03	46

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 03-03-32796).

- [1]. В.Н. Безмельницын, А.В. Елецкий, М.В. Окунь. *УФН* **168** (1998) 1195
- [2]. D.V. Schur, A.G. Dubovoi, N.S. Anikina et al, *Proc. VII ICHMS, Alushta-Cremia-Ukraine, September 16-22, 2001*, pp.478-484
- [3]. Yu.M. Shul'ga, V.M. Martynenko, S.A. Baskakov et al, *Proc. VIII ICHMS, Sudak-Cremia-Ukraine, September 14-20, 2003*, pp.582-583

# ПЕРЕХОД В УПОРЯДОЧЕННОЕ СОСТОЯНИЕ АПРОТОННЫХ РАСТВОРОВ АРОМАТИЧЕСКИХ БЕНЗИМИДАЗОЛОВ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

О.В. Сидоров

*Московский государственный текстильный университет им. А.Н. Косыгина*

Упорядоченное состояние раствора жесткоцепного полимера важно при получении высокопрочных высокомолекулярных материалов. При этом, как правило, растворы должны быть одноосно ориентированными. Такие состояния получаются либо при переходе в жидкокристаллическую фазу, либо при механическом сдвиге в процессе прохождения через фильеры. Однако для апротонных растворов ароматических бензимидазолов жидкокристаллическая фаза при нормальном давлении не наблюдается, а механический сдвиг затруднен при повышении концентрации раствора. Поэтому было исследовано состояние таких растворов при высоких давлениях. Исследование проводилось на промышленных растворах с различным соотношением таутомерных форм с использованием автоматизированной системы Микро-РВТ.

Как показали предыдущие исследования [1,2], при повышении давления в этих растворах наблюдается ряд фазовых переходов в диапазоне 4–5 кбар: первый переход отвечает образованию кристаллосольватов таутомерной формы II, второй - формы III и третий - формы I. При изменении скорости нагружения происходит избирательное расплывание и сглаживание фазовых скачков, что происходит, по-видимому, за счет различных времен релаксации форм в процессе образования кристаллосольватов. Было также установлено, что существует порог циклических нагружений с большими скоростями и резким сбросом давления, после которого раствор не имеет больше выраженных отдельных переходов.

В результате настоящих исследований было установлено, что в апротонных растворах ароматических бензимидазолов происходит упорядочение в случае длительного воздействия статического давления в диапазоне 4–5 кбар. Исследование коэффициентов преломления раствора показало, что изотропия в случае отсутствия давления сменилась на одноосную анизотропию с разностью  $\Delta n = 0.1 \div 0.15$ . При этом выяснилось, что цепи макромолекул стали ориентированными и лежат в плоскости, перпендикулярной направлению приложения давления. В случае последующего воздействия ступенчатого крутящего момента кратковременно наблюдается вынужденная оптическая активность, при этом удельное вращение релаксирует от максимума до нуля, что говорит о радиальной ориентации цепей.

Таким образом, выявлена возможность предварительной ориентации апротонных растворов ароматических бензимидазолов при высоких давлениях и использования таких растворов для повышения прочности формуемых из них изделий.

- [1] О.В. Сидоров, В.Н. Белоненко, В.Ф. Скородумов и др. *Российская конф. "Фазовые превращения при высоких давлениях". Тезисы докладов, 2000* (Черноголовка: ИФТТ РАН) с. 14/4.
- [2] О.В. Сидоров, В.Н. Белоненко *Российская конф. "Фазовые превращения при высоких давлениях". Тезисы докладов, 2002* (Черноголовка: ИФТТ РАН) с. 21/10.

## NEGATIVE THERMAL EXPANSION IN HTSC Hg-BASED COMPOUND UNDER HIGH PRESSURE

S.G. Titova<sup>1</sup>, N.V. Toporova<sup>2</sup>, Yasuo Ohishi<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Metallurgy UrD RAS, Ekaterinburg*

<sup>2</sup>*Ural State University, Ekaterinburg*

<sup>3</sup>*SPring-8, Mikazuki, Sayo, Hyogo 679-5198, Japan*

For HTSC copper oxides, particularly, for  $\text{Hg}_{0.8}\text{Tl}_{0.2}\text{Ba}_2\text{Ca}_2\text{Cu}_3\text{O}_{8+x}$  (Hg,Tl-1223) three structural anomalies have been observed previously:  $T_0 \sim T_c + 15$  K,  $T_1 \sim 150\text{--}160$  K and  $T_2 \sim 240\text{--}250$  K [1]. External pressure leads to increase in the superconducting temperature,  $T_c$ , of the HTSC compounds underdoped or nearly optimally doped by the charge carriers due to both the intrinsic pressure-induced structural change and the increase of the charge-carrier concentration in the “superconducting”  $\text{CuO}_2$ -planes resulting from the charge transfer. To investigate an influence of these factors on the structural anomalies and to obtain more information about their origin, the structural study of Hg,Tl-1223 at high pressure and low temperature has been undertaken at SPring8 source, BL10XU beamline.

The diamond anvil cell was used as a high-pressure cell, the low temperature measurements were performed using a helium cryostat. The imaging plate (R-AXIS IV, 0.10 mm resolution, 300×300 mm area size) was used as the X-ray diffraction detector,  $\lambda = 0.4959$  Å. The exposure time of each measurement was 1–2 min. The measurements at room temperature were carried out at  $P = 1, 3, 12, 15, 20, 35$  GPa. At  $P = 1, 20$  and 35 GPa, the measurements were performed in the range of 100–300 K with the 5 K step on cooling. GSAS program [2] was used to calculate the structural parameters, the obtained discrepancy indexes were as follows:  $wR_p \sim 3\div 5$  %,  $R_p \sim 3\div 4$  %,  $\chi^2 \sim 3\text{--}5$ .

A wide temperature range of a negative thermal expansion between  $T_1$  and  $T_2$  was observed at  $P = 1$  GPa for the first time. No charge transfer upon cooling at fixed pressure was found. All structural anomalies are suppressed at high pressure above  $\sim 20$  GPa. A degree of distortion of  $\text{CuO}_2$ -planes under high pressure has a different behaviour at various temperatures. Obtained results may be explained under assumption of an inhomogeneous state in the temperature range between  $T_1$  and  $T_2$ .

The work is supported by RFBR, grant N 02-03-32959.

[1] S. Titova et al. *J. Supercond.* **11** (1998) 471

[2] A.C. Larson and R.B. Von Dreele LANSCE, MS-H805. LANL, Los Alamos, USA, NM 87545, 1986

## СТРУКТУРНАЯ СТАБИЛЬНОСТЬ ФОСФОРА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

С.А. Останин<sup>1</sup>, В.Ю. Трубицын<sup>2</sup>, С.Ю. Саврасов<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Department of Earth Sciences, University College London, London, United Kingdom*

<sup>2</sup>*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск*

<sup>3</sup>*Department of Physics, New Jersey Institute of Technology, Newark, New Jersey, USA*

Фазовая стабильность фосфора и его сверхпроводимость были изучены в рамках *ab initio* теории функционала электронной плотности и линейного отклика. Для описания экспериментально наблюдаемой последовательности переходов  $sc \rightarrow sh \rightarrow bcc$  мы провели высокоточные расчеты зависимости от объема полной электронной энергии  $E$ . Расчет проводился полно-потенциальным методом линейаризованных присоединенных плоских волн (Wien2K - код). Из рассчитанных кривых  $E(V)$  для различных фаз были получены уравнения состояния  $P(V)$  и термодинамические потенциалы Гиббса  $G(P) = E(V) + PV$ . Давления переходов, определенные в результате анализа потенциалов Гиббса, хорошо согласуются с экспериментом. Так, например,  $sc \rightarrow sh$  переход происходит при 120 GPa (экспериментальное значение 137 GPa), а  $sh \rightarrow bcc$  переход происходит при 258 GPa (экспериментальное значение 262 GPa). Чтобы учесть влияние температуры и построить  $P-T$  фазовую диаграмму в потенциалы Гиббса были добавлены вклады от электронной энтропии и фононов. Энергия и энтропия колебательных состояний учитывался в модели Дебая–Грюнайзена.

Дополнительно в рамках метода линейного отклика были проведены расчеты фононного спектра  $bcc$  фосфора для различных значений объемов ( $V$ ). Эти данные были использованы для оценки константы электрон-фононного взаимодействия  $\lambda$  и температуры сверхпроводящего перехода ( $T_c$ ) в  $bcc$  фосфоре при различных давлениях. Полученные значения  $T_c$  имеют значения от 14 до 22 K в зависимости от давления.

Мы предполагаем, что такие значения температуры сверхпроводящего перехода могут быть достигнуты при нормальном давлении в тонких эпитаксиальных пленках выращенных на V(100), Fe(100) or Cr(100) подложке.

## РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДВУХ АНГАРМОНИЧЕСКИХ МОД ЦИРКОНИЯ

В.Ю. Трубицын

*Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск*

Экспериментально установлено, что все структурные превращения циркония связаны с аномалиями фононного спектра. А именно, предвестником высокотемпературного  $\beta \rightarrow \alpha$  перехода является смягчение поперечной фононой моды в точке  $N$  зоны Бриллюэна (ЗБ)  $OЦК$  решетки при понижении температуры. Возникновение при высоком давлении  $\omega$ -фазы можно объяснить нестабильностью  $OЦК$  решетки циркония по отношению к продольным колебаниям вдоль направления  $[111]$  с волновым вектором  $k = 2/3(1,1,1)$ . И наконец,  $\alpha \rightarrow \omega$  переходу предшествует аномальное уменьшение частоты поперечной оптической моды  $E_{2g}$  в  $\Gamma$  точке ГПУ зоны Бриллюэна при увеличении давления.

В настоящее время теоретически наиболее изученным является  $\beta \rightarrow \alpha$  переход. Так в работе [1] в рамках метода «замороженных фононов» показано, что эффективный потенциал для  $T$  фонона  $Zg$  в  $N$ -точке имеет двух ямный вид и, как следствие, квадрат частоты фонона, вычисленный в рамках гармонического приближения оказывается отрицательным. В работе [1] используя формализм теории возмущения для ангармонических эффектов в кристаллах было показано, что  $OЦК$  фаза циркония становится устойчивой при высокой температуре за счет взаимодействия между  $N$  фононом и другими лежащими в направлении  $(110)$  поперечными колебательными модами.  $OЦК$  решетка циркония оказывается нестабильной и по отношению к смещениям, соответствующим продольным колебаниям  $L$ -моды ( $k = 2/3(1,1,1)$ ). Рассчитанный эффективный потенциал для этой моды имеет сложный трех ямный вид с глобальным минимумом соответствующим  $\omega$ -фазе. Равновесное положение атомов в  $OЦК$  решетке соответствует двум другим неглубоким локальным минимумам. Таким образом, при низкой температуре  $OЦК$  решетка циркония оказывается нестабильной по отношению к смещениям соответствующим поперечным колебаниям для  $L$ -моды. Исследование динамики этой колебательной моды в духе уравнений Ланжевена показало, что при высокой температуре колебания носят принципиально нефононный характер и едва ли могут быть описаны на языке обычного фонон-фононного взаимодействия [2].

В данной работе мы рассматриваем динамику движения двух колебательных мод, соответствующих продольным (сильно ангармоническим) и поперечным (гармоническим) колебаниям с волновым вектором  $k = 2/3(1,1,1)$   $OЦК$  зоны Бриллюэна, помещенных в термостат. Для этого в модели «замороженных» фононов в рамках функционала электронной плотности рассчитан эффективный двумерный потенциал для продольных и поперечных смещений атомов соответствующих выбранным колебательным модам. Затем численным решением стохастических дифференциальных уравнений движения изучена динамика и особенности взаимодействия двух нелинейных осцилляторов, находящихся в этом потенциале при наличии белого шума. Показано, что при температурах, близких к температуре  $\omega \rightarrow \beta$  перехода, наблюдается сильное изменение спектральной плотности и частоты как продольных, так и поперечных колебаний.

[1] Y. Chen et al. *Phys. Rev. B* **31** (1985) 6775

[2] Yu.N. Gornostyrev et al. *Phys. Rev. B* **54** (1996) 3286

# ИЗУЧЕНИЕ УСТОЙЧИВОСТИ СОСУЩЕСТВОВАНИЯ ДВУХ ЗАРЯДОВЫХ СОСТОЯНИЙ РУТЕНИЯ ПРИ ЗАМЕЩЕНИИ Ce И Ru В МАГНИТНОМ СВЕРХПРОВОДНИКЕ CeRu<sub>2</sub>, СИНТЕЗИРОВАННОМ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

А.В. Цвященко<sup>1</sup>, Л.Н. Фомичева<sup>1</sup>, Г.К. Рясный<sup>2</sup>, Б.А. Комиссарова<sup>2</sup>, А.А. Сорокин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Институт физики высоких давлений РАН, Троицк

<sup>2</sup>Институт ядерной физики МГУ, Москва

Метод возмущенных угловых корреляций был использован для измерений параметров сверхтонких электрических квадрупольных взаимодействий на примесных ядрах <sup>111</sup>Cd, находящихся в кристаллографических позициях Ru в ряду соединений Ce<sub>1-x</sub>La<sub>x</sub>Ru<sub>2</sub>, Ce<sub>1-x</sub>Ca<sub>x</sub>Ru<sub>2</sub>, Ce(Ru<sub>1-x</sub>In<sub>x</sub>)<sub>2</sub>, Ce(Ru<sub>1-x</sub>Co<sub>x</sub>)<sub>2</sub>, имеющих структурный тип MgCu<sub>2</sub>. Соединения были приготовлены при давлении 8 ГПа. Ранее нами было обнаружено, что в CeRu<sub>2</sub> сосуществуют два равно заселенных зарядовых состояния рутения: одно с незаполненной 4*d*-зоной (состояние, существующее только при нормальном давлении), а второе – с полностью заполненной электронами 4*d*-зоной (состояние, возникающее в соединении при синтезе выше 5 ГПа), которым на спектре анизотропии соответствует две квадрупольных частоты, равных 220 и 150 МГц, соответственно [1]. Замещение Ce на трехвалентный La приводит к резкому подавлению второго индуцированного давлением зарядового состояния рутения, при концентрации La выше  $x = 0.2$ . Для концентраций лантана меньше 0.2 значение частот и заселенность состояний не изменялась, что указывает на нулевой вклад зонных 4*f*-электронов в градиент электрического поля, действующий на ядра <sup>111</sup>Cd. Трехпроцентное замещение Ce двухвалентным кальцием приводит к резкому подавлению второго состояния, которое возникало вновь при  $x = 0.1$  и подавлялось при  $x > 0.12$ . Такое немонотонное поведение второго зарядового состояния рутения можно связать с *s-d* переходом кальция, возникающим при высоком давлении с увеличением его концентрации. Замещение рутения индием, более чем на полпроцента, приводит к резкому изменению электронной структуры соединения и устойчивому существованию незаполненной 4*d*-полосы. Это указывает на то, что незначительное увеличение доли *sp*-электронов в соединении CeRu<sub>2</sub> приводит к резкому разрушению уникальной электронной структуры, возникающей после синтеза этого соединения при высоком давлении. Замещение Ru на Co изменяет заполнение 4*d*-зоны, образованной электронами рутения, на 3*d*-электроны, которые более совместимы с *d*-электронами рутения и которые, соответственно, не так быстро разрушают зарядовые состояния Ru, как *sp*-электроны индия.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-02-16061).

[1] A.V. Tsvyashchenko, L.N. Fomicheva et al. *Phys. Rev. B* **65** (2002) 174513-1

# DETECTION OF THE Mg–Si–PEROVSKITE PHASE BOUNDARIES IN THE LASER-HEATED DIAMOND CELL: ADVANCES AND DIFFICULTIES

L. Chudinovskikh<sup>1,2</sup>, R. Boehler<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Max-Planck-Institut für Chemie, Mainz, Germany

<sup>2</sup>Institute of Experimental Mineralogy RAS, Chernogolovka

Detection of the pressure and temperature conditions of the Mg-Si-perovskite phase boundary is crucial for estimating mineralogy and temperature in the Earth's mantle at 660 km depth [1,2]. The phase boundary of Mg-Si-perovskite in both MgSiO<sub>3</sub> and Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> systems, extensively measured in the laboratory using diamond-anvil and multi-anvil apparatuses, show considerable variations in pressure, temperature, and slope. The discrepancies may be mainly due to different methods of measuring pressure and temperature but phase kinetics also plays an important role.

In our studies of phase equilibria in the Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> [3] and MgSiO<sub>3</sub> [4] systems relevant to the Mg-Si-perovskite stability we used improved techniques for accurate temperature and pressure measurements in the laser-heated diamond cell. The temperature was measured spectroscopically using Planck's law. Temperature fluctuations and the precision of the measurements were  $\pm 100$  K. Temperature gradients were essentially eliminated by using defocused beams from several powerful lasers and by placing very small samples (10–15  $\mu\text{m}$ ) into metallic (Re or Ir) micro-furnaces embedded in an argon pressure medium. Pressures were measured after heating from several ruby (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:Cr<sup>3+</sup>) chips distributed throughout the sample chamber. These pressures were corrected for the thermal pressure increases,  $P_{\text{th}}$ , during laser heating.  $\Delta P_{\text{th}}$  depends on the temperature, the geometry of the sample assembly, and the size of the hot spot. The latter two were kept nearly the same for all present experiments. Fluorescence spectra were measured from adjacent chips of ruby and strontium borate (SrB<sub>4</sub>O<sub>7</sub>:Sm<sup>2+</sup>) in the closer vicinity of the heated sample. In separate experiments using helium and argon as pressure media we demonstrate that the fluorescence peak of strontium borate has negligible shift with temperature up to at least 700 K and that its shift during heating must therefore be only due to the thermal pressure increase,  $\Delta P_{\text{th}}$ . The ruby fluorescence line may also be used for estimating  $\Delta P_{\text{th}}$ , but this method is less accurate because the temperature of the ruby chips has to be estimated from the measured broadening of the ruby R<sub>1</sub> line and its reported temperature dependence. Thermal pressure corrections between +0.7 and +1.1 GPa, depending on temperature in the range of 1800–2500 K, were applied to the pressures measured with “cold” rubies. We estimate the uncertainty in our reported pressures as  $\pm 0.2$  GPa.

Equilibrium phase boundaries are commonly determined by midpoints of forward and reverse transitions between two phases. Reverse transition have often been proven to be technically difficult. We observed [4] very large hysteresis for the akimotoite  $\leftrightarrow$  perovskite transition at temperatures lower than 2100 K which is likely due to the absence of shear forces in a hydrostatic (molten argon) pressure medium. Additional data points by directly transforming both crystalline [3] and glass [4] starting materials were used for detection of the Ms-Si-perovskite phase boundaries in the Mg<sub>2</sub>SiO<sub>4</sub> and MgSiO<sub>3</sub> systems, respectively.

[1] E. Ito, E. Takahashi. *J. Geophys Res.* **94** (1989) 10637

[2] R. Boehler, A. Chopelas. *Geophys. Res. Lett.* **18** (1991) 1147

[3] L. Chudinovskikh, R. Boehler. *Nature* **411** (2001) 574

[4] L. Chudinovskikh, R. Boehler. *Earth Planet. Sci. Lett.* **219** (2004) 285

## О МОРФОЛОГИЧЕСКИХ ПРЕВРАЩЕНИЯХ ПРИ МИГРАЦИИ И ФАСЕТИРОВАНИИ МЕЖЗЕРЕННЫХ ГРАНИЦ И ИХ ТРОЙНЫХ СОПРЯЖЕНИЙ

В.П. Яшников

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

В *диссипативных динамических системах* обладающих весьма большим или бесконечным числом внутренних степеней свободы, возможны процессы, приводящие с течением времени к спонтанному изменению *размерности* или иных *топологических инвариантов их фазового пространства*. Такого рода события, естественно интерпретировать как *топологические фазовые переходы* в исследуемой системе. Среди других топологических инвариантов, которые могут испытывать скачкообразное изменение в ходе эволюции динамической системы могут быть упомянуты *гомологические характеристики* фазового пространства и его *гомотопический тип*.

В этой связи особый интерес, представляет анализ конденсированных систем, обладающих развитой *многосвященной внутренней поверхностью раздела*. Исследования последних десятилетий показывают, что системы подобного типа обладают бесконечным числом дополнительных *морфологических внутренних степеней свободы*. Кроме структурных превращений объемной фазы, в них могут наблюдаться *сильно неравновесные процессы* с полным или частичным преобразованием атомной структуры, мезогеометрии, макрогеометрии и топологии связанной сетки внутренних границ раздела, не сопровождаемые, однако, фазовыми превращениями объема. Особенностью такого рода преобразований принципиально отличающей их от объемных фазовых превращений является несохранение атомного состава и количества вещества, составляющего внутренние поверхности раздела, что предопределяет далеко идущую аналогию их поведения с эволюцией фронтов химических реакций.

На примерах простейших агрегатов, таких как бикристаллы и трикристаллы различных геометрических форм показано, каким образом сформулированные выше представления о *топологических фазовых переходах в распределенных динамических системах* могут быть использованы для описания *морфологических перестроек* внутренних границ раздела, сопровождающих процессы их *миграции или фасетирования*. Внутренняя поверхность раздела в совокупности со свободной поверхностью в таких агрегатах должна рассматриваться, как *квазидвумерная стратифицированная гетероструктура*, представляющая собой *сборку подсистем* трех топологически, структурно и энергетически различных типов: *границ, линий их многократного сопряжения, а также точек встречи линий сопряжения*.

Миграция индивидуальной границы зерен или тройного сопряжения, также как и фасетирование, будучи аналогами гетерофазных реакций, проявляет способность к саморегулированию, в результате которого процесс морфологических изменений в агрегате оказывается подчиненным определенному *функциональному порядку*, который проявляется в *последовательном во времени характере перехода структурных элементов границы или ее топологического края* из неподвижного состояния в состояние миграции. Такой переход, или иными словами, активизация структурного элемента поверхности раздела, трактуется, как топологическое превращение в *стратифицированном многообразии виртуальных морфологий* индивидуальной границы или тройного сопряжения.



## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ВОДОРОДА С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОМАТЕРИАЛАМИ ПОД ВЫСОКИМ ДАВЛЕНИЕМ

И.О. Башкин, В.Е. Антонов, А.В. Баженов, И.К. Бдикин, Д.Н. Борисенко,  
И.В. Кондратьева, Е.П. Криничная, А.П. Моравский, Ю.А. Осипьян, Е.Г. Понятовский,  
Т.Н. Фурсова, А.И. Харкунов, Ю.М. Шульга

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Московская обл.*

<sup>(1)</sup>*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка, Московская обл.*

Литературные данные об обратимом поглощении (физисорбции) водорода углеродными наноматериалами при давлениях до сотни атмосфер и температурах от 77 до 300 К весьма противоречивы – от 1 и менее до 10 и более вес.% Н.

Целью нашей работы было оценить способность углеродных наноструктур к поглощению водорода под высоким давлением. Обнаружено, что при давлениях водорода до 9 ГПа и температурах, повышенных до 450–500°C, углеродные нановолокна, многостенные и одностенные нанотрубки способны поглощать не менее 7 вес.% Н. Материалы, образующиеся в этих условиях, обладают высокой термической устойчивостью. При нагревании со скоростью около 20°C/мин образцов, закаленных в жидкий азот под давлением, в интервале от 77 К до комнатной температуры наблюдалось лишь слабое (менее 0.5 вес.% Н) газовыделение. Это количество можно приписать физисорбции. Основное количество газа связано прочнее и выделяется при температурах 500°C и выше. Сравнение результатов по газовыделению в калиброванный объем с данными химического анализа методом сжигания в токе кислорода свидетельствует о том, что водород выделяется преимущественно в виде молекул Н<sub>2</sub>, а не углеводородов.

Для выяснения природы связанного состояния основной массы водорода гидрированные продукты были исследованы при комнатной температуре методами рентгеновской дифракции и ИК спектроскопии в сопоставлении с теми же материалами в исходном состоянии и после частичных дегазирующих отжигов. Изменения дифрактограмм многослойных продуктов при гидрировании соответствуют увеличению параметра кристаллической решетки *c* примерно на 40%, от 3.36 до 4.67 Å. После удаления водорода структура восстанавливается. В оптических спектрах наиболее заметным эффектом гидрирования являются узкие линии поглощения при 2860–2920 см<sup>-1</sup>, характерные для валентного колебания С–Н связи. Эти линии исчезают из спектров, если из гидрированных образцов частичным отжигом удалить ~40% водорода. Сумму данных можно интерпретировать в предположении о двух состояниях водорода: часть водорода захватывается на С–Н связи, но более половины сильно связанного водорода присутствует, по-видимому, в виде молекул Н<sub>2</sub>, неактивных в ИК спектре.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 03-02-16011, программы Миннауки "Управляемый синтез фуллеренов и других атомных кластеров" и программы ОФН РАН "Новые материалы и структуры".

## ВЫСОКОСКОРОСТНАЯ ДЕФОРМАЦИЯ СТАЛИ В СХОДЯЩИХСЯ УДАРНЫХ ВОЛНАХ

В.И. Зельдович<sup>1</sup>, Н.Ю. Фролова<sup>1</sup>, А.Э. Хейфец<sup>1</sup>, Б.В. Литвинов<sup>2</sup>, Н.П. Пурьгин<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики металлов УрО РАН, Екатеринбург*

<sup>2</sup>*Российский Федеральный Ядерный Центр-ВНИИТФ, Снежинск*

Высокоскоростная деформация материалов, вызванная действием ударных волн, может быть разделена на равномерную и локализованную. Равномерная деформация приводит к повышению плотности дефектов кристаллического строения (дислокаций, двойников, вакансий и т.д.) во всем объеме нагруженного материала. Локализованная деформация, которая происходит в отдельных участках, может быть весьма велика. Если в процессе этой деформации отсутствует теплообмен с окружающими областями, то температура в деформированных участках повышается. Повышение температуры снижает сопротивление сдвигу, и это способствует дальнейшей деформации. Такой автокаталитический процесс приводит к образованию полос адиабатического сдвига.

В качестве материала, нагружаемого ударными волнами, была выбрана сталь со структурой перлита, который представляет собой механическую смесь параллельных чередующихся пластин мягкой (феррит) и твердой (цементит) фаз. Деформационные процессы в пластинчатой структуре можно изучать по смещению участков пластин относительно друг друга.

Нагружение стали квазисферической сходящейся ударной волной с давлением 50 ГПа и более привело к существенным изменениям исходной феррито–перлитной структуры стали [1]. Электронно-микроскопические исследования микроструктуры (при увеличении в 30 тыс. раз и более) нагруженного шарового образца позволили выявить “тонкие” особенности равномерной деформации. Пластины феррита пластически деформировались, сохраняя сплошность, пластины цементита разрушались. “Осколки” разрушенных пластин изменяли свое расположение относительно друг друга, и это позволило наблюдать деформации сдвига и ротации микрообъемов материала размерами в 0.1–0.3 мкм. Современная техника непрерывных измерений механических напряжений и скорости вещества в ударно-волновых экспериментах обеспечивает разрешающую способность в пространстве на уровне 10 мкм [2], тогда как анализ наших электронно-микроскопических снимков позволяет наблюдать перемещения (деформации) с разрешением на два порядка выше. Было показано, что деформации сдвига и ротации в пластинчатой структуре перлита существенно зависят от ориентации пластин относительно фронта ударной волны.

При данной схеме нагружения стального шара обнаружены различные эффекты локализованной деформации: полосы адиабатического сдвига, идущие от поверхности; течение материала вблизи центральной полости, обусловленное неустойчивостью сходящегося радиального движения.

Работа выполнена по программе Президиума РАН “Теплофизика и механика интенсивных энергетических воздействий” и при поддержке проекта НШ-778.2003.3.

[1] Н.Ю. Фролова, В.И. Зельдович, А.Э. Хейфец, Б.В. Литвинов, Н.П. Пурьгин, В.И. Бузанов. *Физика металлов и металловедение* **98** (2004) в печати.

[2] Г.И. Канель, С.В. Разоренов. *Физическая мезомеханика* **2**(4) (1999) 13

## АМОРФИЗАЦИЯ И ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В $\text{Eu}_2(\text{MoO}_4)_3$ ПРИ ВЫСОКОМ ДАВЛЕНИИ

В.В. Синецын<sup>1</sup>, В.П. Дмитриев<sup>2</sup>, Д. Махон<sup>2</sup>, Б.С. Редькин<sup>1</sup>, Х.–П. Вебер<sup>2</sup>,  
Е.Г. Понятовский<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики твердого тела РАН, 142432, п. Черноголовка, Московской обл.*

<sup>2</sup>*Group "Structure of Materials under Extreme Conditions", Swiss-Norwegian Beam Lines at ESRF, BP 220, F-38043 Grenoble, France*

Кристаллы семейства  $\text{R}_2(\text{MoO}_4)_3$  (где  $\text{R} = \text{Pr}, \text{Nd}, \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$ ) образуют изоструктурный ряд при атмосферном давлении. При комнатной температуре стабильной кристаллической модификацией этих соединений является моноклинная  $\alpha$ -фаза, которая при температурах  $\sim 1078\text{--}1260$  К переходит в тетрагональную  $\beta$ -фазу. Обратный переход в более плотную  $\alpha$ -фазу при охлаждении подавляется из-за большой разности удельных объемов, что позволяет даже при малых скоростях снижения температуры переохладить  $\beta$ -фазу до низких температур.

Впервые аморфизация под давлением ( $P \approx 60$  кбар и  $T < 670$  К) в этом классе веществ была обнаружена в  $\text{Gd}_2(\text{MoO}_4)_3$  в 70-ые годы.  $\text{R}_2(\text{MoO}_4)_3$  соединения затем весьма интенсивно исследовались многочисленными группами, но вопрос о причинах аморфизации до сих пор окончательно не выяснен. Оценки на базе соотношений удельных объемов свидетельствуют, что термодинамическим стимулом аморфизации в рассматриваемых кристаллах может быть как полиморфное превращение  $\beta \rightarrow \alpha$  ( $\Delta V = -34.3$  см<sup>3</sup>/моль) так и химическая деструкция  $\text{Gd}_2(\text{MoO}_4)_3 \rightarrow \text{Gd}_2\text{O}_3 + 3\text{MoO}_3$  ( $\Delta V = -33.7$  см<sup>3</sup>/моль).

Как видно, распад молибдатов на окислы металлов сопровождается приблизительно тем же уменьшением объёма, что и полиморфный переход. В этой связи важным становится не только детальное исследование процесса аморфизации и физических свойств аморфного состояния, но и последовательности структурных состояний в этих соединениях до превращения в аморфное состояние. Такие исследования были проведены нами на кристалле  $\text{Eu}_2(\text{MoO}_4)_3$  методами рентгено-структурного анализа, оптической спектроскопии и измерений диэлектрической проницаемости при давлениях до  $\sim 150\text{--}200$  кбар.

Работа поддержана проектом РФФИ 04-02-17143 и программой Отделения физических наук РАН "Физика и механика сильно сжатого вещества и проблемы внутреннего строения Земли и планет".

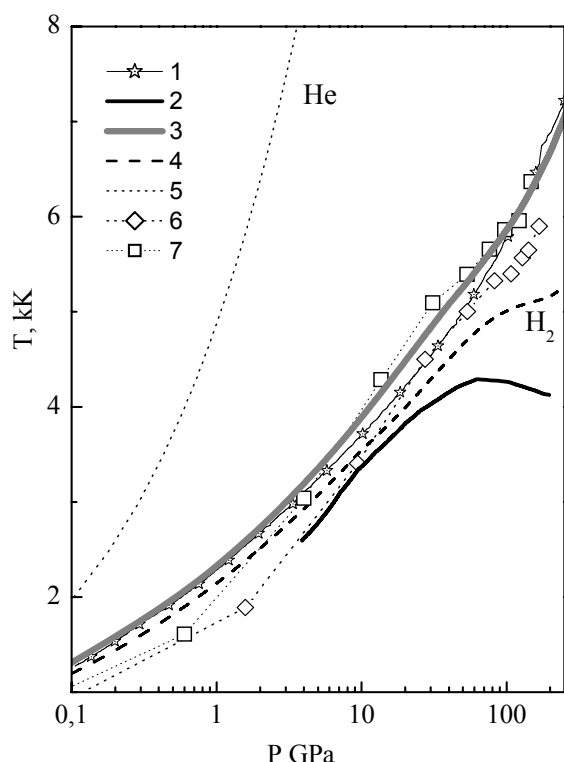
## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ УСЛОВИЙ ПЕРЕХОДА В ПРОВОДЯЩЕЕ СОСТОЯНИЕ АТМОСФЕРЫ ЮПИТЕРА

В.Я. Терновой, С.В. Квитов, А.А. Пяллинг, А.С. Филимонов, В.Е. Фортов

*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

Выполнены эксперименты по одновременному измерению интенсивности оптического излучения и сопротивления слоя водородно-гелиевой смеси с массовым содержанием гелия  $Y \cong 0.24$  ( $Y = m_{\text{He}}/(m_{\text{He}}+m_{\text{H}})$ ), соответствующей составу внешних слоев атмосферы Юпитера [1], при ее многократном ударном сжатии до 164 ГПа в плоской геометрии. Начальное давление смеси было выбрано 8 МПа, что при начальной температуре смеси 77.4 К и скорости стальных ударников 6.2 км/с позволило на конечных стадиях сжатия генерировать состояния, близкие к состояниям адиабаты атмосферы Юпитера по моделям [1-3].

$P$ - $T$  диаграмма процесса сжатия приведена на рисунке. Условия появления проводящей фазы в процессе сжатия и уровень достигаемой электрической проводимости представлены в таблице.



$P$ - $T$  диаграмма адиабаты атмосферы Юпитера и адиабат водорода и гелия, стартующих с уровня давления 0.1 МПа и температуры 165 К. 1, 2, 3 – расчетные адиабаты, соответственно, [2], [3] и наша; 4, 5 – адиабаты водорода и гелия; 6, 7 – траектории состояний многократного ударного сжатия.

Условия появления проводящей фазы в процессе сжатия и уровень достигаемой электрической проводимости представлены в таблице.

N п/п	0	1	2	3	4	5	6	7	12
$\rho$ , г/см <sup>3</sup>	0.0291	0.110	0.23	<b>0.365</b>	<b>0.494</b>	0.603	0.68	0.737	0.831
$P$ , ГПа	0.0081	1.57	9.03	<b>26.5</b>	<b>51.7</b>	80	104.4	124.6	164
$T$ , К	77.4	1845	3320	<b>4380</b>	<b>4940</b>	5020	5205	5380	5690
$U$ , мВ	1025.2			<b>1013</b>	<b>336.9</b>	208.9	168.9	128.9	104.9
$R$ , Ом				<b>43</b>	<b>0.254</b>	0.133	0.102	0.0756	0.059
$L$ , мм	4.938			<b>0.394</b>	<b>0.291</b>	0.238	0.211	0.195	0.173
$\rho$ , Ом*см				<b>2.577</b>	<b>0.018</b>	0.010	0.0084	0.0063	0.0052
$\Sigma$ , 1/Ом/см				<b>0.388</b>	<b>55.05</b>	96.87	118.9	158.5	194

[1] T.V. Gudkova, V.N. Zharkov. *Planetary and Space Science*, **47** (1999) 1201

[2] D. Saumon, G. Chabrier, H.M. Van Horn. *J. Suppl. Ser.*, **99** (1995) 713

[3] W.J. Nellis. *Planetary and Space Science*, **48** (2000) 671

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СМЕСИ МЕДЬ – УГЛЕРОД ПРИ УДАРНО-ВОЛНОВОМ НАГРУЖЕНИИ

Д.А. Азарова, А.С. Зелепугин, С.А. Зелепугин, О.В. Иванова

*Отдел структурной макрокинетики Томского научного центра СО РАН, Томск*

Ударно-волновые методы зарекомендовали себя как эффективный способ синтеза новых материалов и химических соединений, которые трудно получить традиционными методами. С помощью ударно-волновых методов решаются такие технологические проблемы, как упрочнение материалов и изделий из них, прессование, активирование неорганических материалов. Также такой подход предоставляет большие возможности для осуществления фазовых и структурных превращений в материалах, получения искусственных алмазов, нитрида бора и других сверхтвердых материалов.

Несмотря на большие научные достижения в области динамического синтеза сверхтвердых материалов и промышленную реализацию некоторых из них, проблема далека от полного решения. Синтез алмазов при ударном сжатии происходит за время порядка микросекунд в интервале давлений 200–400 кбар, выход продукта составляет только несколько процентов. Воздействие высоких давлений имеет отрицательные последствия – возникают волны разгрузки, приводящие к прекращению процесса синтеза и разрушению образцов, высокие температуры могут вызывать отжиг синтезированных кристаллов алмазов. Поиск возможностей осуществления переходов к кубической фазе в углероде (или гексагональном нитриде бора) в умеренных динамических условиях нагружения является в настоящее время актуальным [1].

В данной работе поведение системы Cu–C при ударе исследовали численно методом конечных элементов. В расчетах моделировали поведение сборки, которая использовалась в экспериментах по синтезу кристаллов алмазов. Ударник представлял собой цилиндр из алюминия диаметром 30 мм, высотой 46 мм. Капсула высотой 60 мм и внешним диаметром 22 мм содержала спрессованную по взрывной технологии и предварительно нагретую смесь Cu–C ( $d_0 = 18$  мм,  $\rho_0 = 6.8$  г/см<sup>3</sup>, начальная пористость 6%,  $T_0 = 1100$  К), толщина боковой стальной стенки капсулы 2 мм. На тыле капсулы была расположена жесткая стенка. Скорость ударника варьировали в пределах 600–1200 м/с.

Расчеты показывают, что реализующиеся пиковые давления в смеси (10–60 кбар), время их действия (до 4 мкс), температура (может достигать температуры плавления меди) недостаточны для перехода к кубической фазе, исходя из фазовой диаграммы углерода. Для обеспечения таких переходов в умеренных динамических условиях нагружения необходимыми становятся предварительная обработка смеси (механическое активирование, динамическое компактирование, предварительный нагрев) и применение катализаторов процесса фазовых переходов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 03-01-00122).

- [1] S.A. Zelepugin, A.G. Dorfman, E.Sh. Chagelishvili. *Proc. Int. Conf. «Shock Waves in Condensed Matter-2002»*, 2002 (St. Petersburg) p. 214

## МЕТАЛЛИЗАЦИЯ КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗЫ ИНЕРТНОГО ГАЗА С ПРИМЕСЯМИ ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Ю.Б. Кудасов, А.С. Коршунов

*Российский Федеральный Ядерный Центр – ВНИИЭФ, пр. Мира 37, г. Саров, 607188*

Примесь тяжелого инертного газа в конденсированной фазе легкого инертного газа создает в запрещенной щели глубокий донорный уровень. При возрастании давления этот уровень приближается к дну зоны проводимости и становится определяющим фактором транспортных свойства вещества. Проведены расчеты электронной структуры упорядоченного раствора  $\text{Ag}_{15}\text{Xe}$ . Показано, что допирование конденсированной фазы легкого инертного газа атомами более тяжелого инертного газа может служить удобным инструментом при исследовании процесса металлизации в инертных газах.

# СПЕКТРАЛЬНЫЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ВЛИЯНИЯ ДАВЛЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРЫ НА ПРОДУКТЫ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub>

Н.Г. Спицына<sup>1</sup>, А.А. Лобач<sup>2</sup>, А.Д. Дубровский<sup>1</sup>, М.Г. Каплунов<sup>1</sup>, И.В. Кондратьева<sup>3</sup>,  
И.О. Башкин<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Институт проблем химической физики РАН, Черноголовка*

<sup>2</sup>*РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва*

<sup>3</sup>*МГУ им. М.И. Ломоносова, Москва*

<sup>4</sup>*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

Большое внимание в области физики и химии фуллеренов уделяется получению и изучению свойств димеров [60]фуллерена, его олигомеров и полимеров в связи с открытием в этих соединениях ферромагнетизма [1] и металлических свойств [2]. Экспериментальные исследования показали, что димеры и полимеры [60]фуллерена образуются при фотополимеризации, в реакциях при высоких давлениях и температуре, при допировании фуллерена щелочными металлами, в реакции с олеумом [1-4]. Димер [60]фуллерена есть продукт [2+2]-циклоприсоединения и согласно расчетным данным является самым устойчивым [5]. Многочисленные данные по изменению спектров оптического поглощения [60]фуллерена при воздействии гидростатического давления носят описательный характер и имеют большой разброс. В данной работе обсуждены спектральные особенности полимерных фаз фуллерена, полученных при воздействии высоких давлений на поликристаллические образцы C<sub>60</sub> (**1**), молекулярные комплексы (ET)<sub>2</sub>·C<sub>60</sub> (**2**) и TMTSF·C<sub>60</sub>·2(CS<sub>2</sub>) (**3**). Методами ЭПР, ИК спектроскопии и порошковой рентгенографии охарактеризованы продукты, полученные при температуре 400°C и давлении 4.5 ГПа (тетрагональная фаза, в которой молекулы C<sub>60</sub> соединяются в прямоугольные сетки); при давлении 5.5 ГПа и температуре 650°C (ромбоэдрическая фаза, где молекулы C<sub>60</sub> соединяются в гексагональные сетки); продукты после воздействия температуры (25°C, 100°C, 150°C) и давления 4.5–7 ГПа на молекулярные комплексы **2**, **3**, а также методом рентгеноспектрального микроанализа в электронном микроскопе определен элементный состав, изучена микроструктура поверхности образцов. Результаты исследования поведения электропроводности поликристаллических образцов TMTSF·C<sub>60</sub>·2(CS<sub>2</sub>) и (ET)<sub>2</sub>·C<sub>60</sub> при их нагружении в интервале давлений до 7 ГПа при комнатной температуре и при 150°C отражают фазовые превращения в комплексах. Проведен сравнительный анализ ИК спектров образцов различных полимерных фаз C<sub>60</sub>, в случае образца **3** установлено лучшее согласие со спектром димера C<sub>120</sub>.

- [1] T.L. Makarova, B. Sungvist, et.al. *Nature* **413** (2001) 716
- [2] Ю.А. Осипьян, К.Л. Каган, В.И. Кулаков, Ф.Н. Лурьянчик, Р.П. Николаев, В.И. Постнов, Н.С. Сидоров, В.В. Кведер, В.Е. Фортов. *Письма в ЖЭТФ* **75** (2002) 680
- [3] S. Pekker, A. Janossy, L. Mihaly, O. Chauvet, M. Carrard, L. Ferro, *Science* **265** (1994) 1077
- [4] О.Г. Гаркуша, С.П. Солодовников, Б.В. Локшин. *Изв. АН, Сер. хим.*, (4) (2002) 582
- [5] Е.Г. Гальперн, И.В. Станкевич, А.Л. Чистяков, Л.А. Чернозатонский. *Изв. АН, Сер. хим.*, (1) (1998) 7

## СТРУКТУРНЫЕ ПЕРЕХОДЫ И СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ СПЛАВОВ Zr ПОД ДАВЛЕНИЕМ

В.Г. Тиссен, Т.Е. Антонова, И.О. Башкин, М.В. Нефедова, Е.Г. Понятовский

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка, Московская обл.*

Открытие переходов из гексагональной  $\omega$  в ОЦК  $\beta$ -фазу в Zr и Hf в 1990 г. возбудило интерес к эффектам воздействия высокого давления в металлах подгруппы Ti. Полиморфизм перехода  $\omega$ - $\beta$  трактуется как следствие  $s$ - $d$  электронных переходов при сжатии кристаллической решетки этих металлов. Обсуждается взаимозависимость между степенью заполнения  $d$ -зоны и физическими свойствами металлов IV и V групп.

Нами проведены измерения температуры сверхпроводящего перехода  $T_C$  для Zr и его сплавов с Ti и Hf.:  $Zr_{70}Ti_{30}$ ,  $Zr_{50}Ti_{50}$ ,  $Zr_{80}Hf_{20}$ ,  $Zr_{67}Hf_{33}$ ,  $Zr_{49}Hf_{51}$ ,  $Zr_{27}Hf_{73}$  и Hf при различных давлениях.  $T_C$  определялась по аномалии на температурных зависимостях магнитной восприимчивости на переменном токе. Для генерации давлений использовался аппарат с алмазными наковальнями. Для некоторых из указанных сплавов исследовано влияние давления на кристаллическую структуру с использованием синхротронного излучения.

Качественно поведение  $T_C$  как функции давления для всех исследованных сплавов подобно: рост  $T_C$  при увеличении давления в ГПУ (стабильной при атмосферном давлении и комнатной температуре) и  $\omega$  фазах завершается скачком при переходе в ОЦК фазу, а далее наблюдается падение  $T_C$ . Изобарические кривые  $T_C$  как функция состава для ОЦК фазы в системах Zr-Ti и Zr-Hf по форме близки к аналогичным кривым для систем IVb-Vb при атмосферном давлении, что согласуется с представлениями о  $s$ - $d$  электронном переходе под давлением в элементах IVb группы.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ № 03-02-17005 и программы Президиума РАН "Теплофизика и механика интенсивных импульсных воздействий".



## ВЛИЯНИЕ СОСТАВА ФЛЮИДА НА ПРОЦЕССЫ ПЛАВЛЕНИЯ КАЛЬЦИТА И ДОЛОМИТА ПРИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЯХ

Э.С. Персиков, П.Г. Бухтияров

*Институт экспериментальной минералогии РАН, Черноголовка*

Эксперименты по плавлению кальцита (Cal) и доломита (Dol) впервые проведены с помощью уникальной установки высокого газового давления [1] при температурах до 1310°C и давлении флюида разного состава (Ar, Ar + H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> + H<sub>2</sub>O), равном 1 кбар, с целью изучения влияния состава флюида на процессы плавления карбонатов.

Показано, что при указанном давлении как аргонового, так и углекислотного обезвоженного флюидов, кальцит плавится инконгруентно при  $T = 1310 \pm 10^\circ\text{C}$  с выделением 5.27 вес. % CO<sub>2</sub> во флюид и образованием карбонатитового расплава 92.3Cal + 7.7CaO (вес. %). Доломит в этих условиях разлагается по реакции частичной декарбонатизации при  $T > 800^\circ\text{C}$  с образованием периклаза (MgO), CO<sub>2</sub> и кальцита, который плавится инконгруентно при  $T = 1310^\circ\text{C}$ . Суммарное количество CO<sub>2</sub>, которое удаляется при этом из доломита во флюидную фазу равно 26.8 вес. %.

Кардинально меняется механизм плавления карбонатов при добавлении H<sub>2</sub>O во флюид. Согласно полученным экспериментальным данным кальцит в этом случае начинает плавиться при  $T = 1100^\circ\text{C}$  и полностью расплавляется при повышенных температурах с выделением около 13 вес. % CO<sub>2</sub>. Кальцит и ассоциация (Cal + Prd + CaO) были обнаружены с помощью микрозонда в образцах после их изобарической закалки. Этот результат невозможно объяснить механизмом инконгруентного плавления кальцита, так как потеря CO<sub>2</sub> из образца в этом случае была бы только 5.27 вес. % (см. выше). На основе анализа полученных экспериментальных данных предложен следующий механизм плавления кальцита под давлением водосодержащего флюида.

Кальцит в этих условиях должен частично прореагировать с водой из флюидной фазы с образованием порландита (Prd) - Ca(OH)<sub>2</sub> в температурном диапазоне 510–650°C. В температурном диапазоне 680–1100°C должна образоваться система: эвтектический расплав 56Prd + 44Cal (вес. %) + твердый Cal. При  $T > 1100^\circ\text{C}$  упомянутая система полностью расплавится с образованием карбонатитового расплава 80Cal + 20CaO (вес. %) и потерей 13 вес. % CO<sub>2</sub> во флюидную фазу.

Доломит под давлением водосодержащего флюида разлагается по реакции частичной диссоциации при  $T < 510^\circ\text{C}$  с образованием периклаза (Per), CO<sub>2</sub> и кальцита, который при повышении температуры опытов плавится по указанному выше механизму. При этом во флюид выделяется около 30.5 вес. % суммарного количества CO<sub>2</sub>. Потеря CO<sub>2</sub> из этих образцов во флюид не соответствует реакции полной декарбонатизации доломита (47.7 вес. %) и, напротив, хорошо соответствует результатам расчетов баланса масс с учетом предложенного механизма парциального плавления доломита. Образовавшийся в опытах карбонатитовый расплав в виду его низкой плотности и чрезвычайно низкой вязкости практически полностью отделялся от преимущественно периклазового рестита и собирался на дне платиновой ампулы. Преимущественно периклаз и небольшое количество кальцита в рестите, а также кальцит, порландит и ассоциация (Cal + Prd + CaO) в карбонатитовом расплаве были обнаружены с помощью микрозонда в экспериментальных образцах после их изобарической закалки.

*(Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 03-05-64808)*

1. Persikov, E.S., Bukhtiyarov P.G. *J. Conf. Abs.* 7 [1] (2002) 85.

# АНОМАЛИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В МОЛИБДАТЕ ТЕРБИЯ ПРИ ГИДРОСТАТИЧЕСКОМ ДАВЛЕНИИ ДО 18 КБАР И ТЕМПЕРАТУРЕ ДО 290°С

Б. К. Пономарёв, И. В. Кулешов, Б. С. Редькин

*Институт физики твёрдого тела РАН, Черноголовка, Московской обл.*

Измерены температурные зависимости электрической поляризации монокристаллических образцов молибдата тербия  $Tb_2(MoO_4)_3$  при температуре от 20 до 290°С и гидростатическом давлении до 18 кбар. Образцы имели форму прямоугольных параллелепипедов с размерами  $3 \times 5 \times 1$  мм<sup>3</sup>. Перед измерениями образцы монодоменизировали. Измерения электрической поляризации были выполнены при помощи электрометрического вольтметра В7-45. Гидростатическое давление создавалось в установке типа поршень-цилиндр. Так как при переходе через сегнетоэлектрическую температуру Кюри при понижении температуры образец разбивался на сегнетоэлектрические домены, каждая изобара измерялась на отдельном образце. Все образцы были вырезаны из одного монокристалла.

При атмосферном давлении выше температуры Кюри  $\sim 155^\circ C$  (т.е. номинально в параэлектрической фазе) наблюдалось заметное изменение электрической поляризации, совпадающее по знаку со спонтанной электрической поляризацией. При температуре  $220^\circ C$  это изменение превышало значение спонтанной электрической поляризации  $P_s = 190 \times 10^{-9} \text{Coul/cm}^2$ . При  $T = 290^\circ C$  электрическая поляризация достигла значения  $10^{-6} \text{Coul/cm}^2$ , т.е. в пять раз превысила значение спонтанной поляризации.

Аналогичные результаты получены при давлениях 16 и 18 килобар. При высоких давлениях сегнетоэлектрический переход заметно размыт по сравнению с переходом при атмосферном давлении. Природа наблюдаемых аномалий неясна. Можно предположить, что они связаны с неизвестным структурным фазовым переходом. После извлечения образца из камеры высокого давления сопротивление образца составляло  $R \approx (10 - 100) \Omega$ , т.е. было на 10 порядков ниже обычного сопротивления молибдата тербия. Это высокопроводящее состояние образца было неустойчивым. По истечении времени порядка нескольких часов сопротивление образца возвращалось к исходному высокому значению (порядка  $10^{12} \Omega$ ).

Авторы благодарны Е.Г. Понятовскому за полезные обсуждения и помощь в измерениях под высоким давлением.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных исследований, проект 02-02-16679.

## ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ СМАЧИВАНИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В АЛЮМИНИИ РАСПЛАВОМ (Zn,Al)

О.А. Когтенкова<sup>1</sup>, С.Г. Протасова<sup>1</sup>, Б.Б. Страумал<sup>1</sup>, Г. Лопес<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

<sup>2</sup>*Институт металловедения об-ва им. Макса Планка, Штутгарт*

Зернограничные фазовые переходы смачивания были изучены в поликристаллах Al–Zn с содержанием цинка 10, 20, 30, 40, 60, 75 и 85 вес. % в интервале температур 490–630°C. Было обнаружено, что выше 620°C все границы зерен в твердой фазе, богатой алюминием, были смочены жидкой фазой. Ниже 440°C границ зерен, смоченных жидкой фазой, не наблюдалось. Таким образом, были определены минимальная и максимальная температуры зернограничного фазового перехода смачивания. Между 440 и 620 °C доля смоченных границ зерен постепенно увеличивается с увеличением температуры от 0 до 100 %. Были выращены три бикристалла алюминия с границами наклона [110] – малоугловой с максимальной (для малоугловых границ) энергией, высокоугловой с максимальной (для высокоугловых границ) энергией и высокоугловой двойниковая граница с минимальной (для высокоугловых границ) энергией. Максимальная температура фазового перехода смачивания наблюдается для двойниковой границы. Сформулирована гипотеза о том, что зернограничные фазовые переходы предсмачивания или предплавления могут объяснить необычное явление высокоскоростной сверхпластичности, наблюдаемое в системах Al–Mg–Zn в узком температурном интервале непосредственно под линией объемного солидуса. Авторы благодарят РФФИ (проект 04-03-32800), НАТО (проект PST.CLG.979375), INTAS (проект 03-51-3779), Миннауки и образования ФРГ (проект RUS 04/014).

## ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ СМАЧИВАНИЯ ГРАНИЦ ЗЕРЕН В ЦИНКЕ РАСПЛАВОМ (Al,Zn)

А.С. Хрущева, В.Г. Сурсаева, Б.Б. Страумал

*Институт физики твердого тела РАН, Черноголовка*

Плоские бикристаллы цинка с границами наклона  $[11\bar{2}0]$  были выращены методом направленной кристаллизации из цинка чистотой 99,999 wt.%. Были выращены три бикристалла с разными границами наклона – (а) малоугловой с разориентацией  $11.5^\circ$  и максимальной (для малоугловых границ) энергией, (б) высокоугловой с разориентацией  $46^\circ$  и максимальной (для высокоугловых границ) энергией и (в) высокоугловой с разориентацией  $84^\circ$  (двойниковая граница) с минимальной (для высокоугловых границ) энергией. Бикристаллы покрывались слоем сплава Al-Zn и отжигались в двухфазной области фазовой диаграммы Al-Zn, в которой твердый раствор на основе цинка находится в равновесии с расплавом. Зернограничный фазовый переход смачивания наблюдался на всех изученных границах около  $418^\circ\text{C}$ . До сих пор все наблюдавшиеся температурные зависимости контактного угла при фазовом переходе смачивания на границах зерен были выпуклыми. При температуре фазового перехода смачивания производная контактного угла – а значит и производная свободной энергии границы по температуре испытывали скачок. Иными словами все наблюдавшиеся до сих пор фазовые переходы смачивания на границах зерен были первого рода. Наблюдавшиеся в данной работе температурные зависимости были вогнутыми, а в точке перехода не наблюдалось скачка производной контактного угла (и свободной энергии) границы по температуре. Следовательно – впервые наблюдался зернограничный фазовый переход смачивания второго рода. Авторы благодарят РФФИ (проект 04-03-32800), НАТО (проект PST.CLG.979375), INTAS (проект 03-51-3779), Миннауки и образования ФРГ (проект RUS 04/014).

## GRAIN BOUNDARY PHASE TRANSITION “WETTING BY SOLID STATE” IN Zn–Al ALLOYS

B.B. Straumal<sup>1</sup>, G.A. López<sup>2</sup> and A.S. Khruzhcheva<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Solid State Physics RAS, Chernogolovka*

<sup>2</sup>*Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart*

The microstructure of Zn–5 wt. % Al polycrystals has been studied between 250 and 375°C. The evolution of continuous (Al) layers at individual Zn grain boundaries (GBs) has been studied at 230 and 290°C. The (Al) phase forms either chains of separated lens-like precipitates or continuous uniform layers at (Zn) GBs. If the GB particles are observed, the contact angle  $\theta > 0$  at the intersection between (Al)/(Zn) interphase boundaries (IBs) and (Zn)/(Zn) GB. With increasing temperature  $\theta$  becomes zero at certain  $T_{ws}$ , and remains zero above  $T_{ws}$ . Above  $T_{ws}$ , a (Zn) GB is covered by continuous (Al) layer.  $T_{ws}$  inversely correlates with the GB energy. The fraction of (Zn) GBs covered by (Al) layers increases with increasing temperature. Therefore, the GB phase transition “wetting by solid phase” proceeds in Zn–Al alloys. It is thermodynamically similar to the GB wetting phase transition by liquid phase. The tie-line of a GB phase transition is constructed in the conventional bulk Zn–Al phase diagram. Such GB tie-lines are especially important for the nanocrystalline materials. Financial support of NATO Linkage grant (contract PST.CLG.979375), German Federal Ministry for Education and Research (contract RUS 04/014), INTAS (contract 03-51-3779) and Russian Foundation for Basic Research RFBR (contract 04-03-32800) is acknowledged.

## PRESSURE INDUCED PHASE TRANSFORMATION IN ERBIUM TRIHYDRIDE

T. Palasyuk and M. Tkacz

*Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sciences, Kasprzaka 44/52, 01-224  
Warsaw, Poland*

X-ray diffraction studies on metal hydrides subjected to high pressure provide valuable information about type of metal hydrogen bonding. Pressure dependence of hydride volume can be divided into metal and hydrogen contributions as described earlier [1] that allow for discussion on the behavior of hydrogen particle in matrix of the host metal. Determination of lattice parameters as a function of pressure allows the formulation of the equation of state of the hydride being investigated. Finally, pressure induced phase transitions could be expected. The simplest examples of the structural phase transformation from NaCl type to CsCl structures of some alkali metal hydrides have been reported [2-4]. In this respect the lanthanide metal hydrides could offer a unique opportunity for such a study as by increasing hydrogen concentration different structural phases can be produced. The high pressure resistometric and pressure-volume measurements carried out on some lanthanide trihydrides have been interpreted in terms of possible hexagonal to cubic phase transition [5]. For some lanthanide metal hydrides a transition from insulating to metallic phase under high pressure is theoretically expected [6,7]. Recently the unsuccessful search for such a transition in  $\text{YH}_3$  up to 25 GPa has been published [8].

High-pressure X-ray diffraction studies of the erbium trihydride have been carried out in diamond anvil cell up to 30 GPa at room temperature. The structural phase transformation from the hexagonal to cubic phase has been detected at pressure of about 15 GPa. The molar volume of  $\text{ErH}_3$  as a function of pressure has been fitted to Murnaghan equation of state. Bulk modulus  $B_0$  and its pressure derivative  $B_0'$  have been determined for both phases. The lattice parameter of new cubic phase was determined as equal to 5.23 Å at normal pressure. The volume change accompanied by the phase transition has been calculated.

- [1] B. Baranowski M. Tkacz, S. Majchrzak, Pressure dependence of hydrogen volume in some metallic hydrides, in *Molecular Systems under Pressure*, R Pucci and G. Piccino (eds), Elsevier Science Publ. 1991, pp. 139-156
- [2] I.O. Bashkin, T.N. Dymova, E.G. Ponyatovski, *Phys. Stat. Sol. (b)* **100** (1980) 87
- [3] H.D. Hochheimer, K. Stroesner, W. Hoenle, B. Baranowski, S. Filipek, *Z. Phys. Chem. (N.F.)* **143** (1985) p. 139
- [4] J. Duclos, Y. Vohra, A.L. Ruoff, S. Filipek, B. Baranowski, *Phys. Rev.* **B36** (1987) 7664
- [5] I.O. Bashkin, E.G. Ponyatovski, M.E. Kost, *Phys. Stat. Sol. (b)* **83** (1977) 517
- [6] P.J. Kelly, J.P. Dekker, R. Stumpf, *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997) 1315
- [7] R. Ahuja, B. Johansson, J.M. Mills, O Eriksson, *Appl. Phys. Lett.* **71** (1997) 3497
- [8] R.J. Wijngaarden, J.N. Huiberts, D. Negengast, J.H. Rector, R. Griessen, M. Hanfland, F. Zolntone, *J. Alloys Compounds* **308** (2000) 44

**[O-1] I.A. Abrikosov**

First-Principles Simulations of Alloy Thermodynamics at High Pressure

Department of Physics and Measurements Technology, Linköping University, SE-58183 Linköping, Sweden

**[O-2] А.Н. Бабушкин, Я.Ю. Волкова, О.В. Нарыгина, С.Н. Шкерин, Е.Д. Образцова**

Комплексное сопротивление одностенных углеродных нанотрубок при давлениях до 50 ГПа

Complex Impedance of Single-Walled Carbon Nanotubes at Pressures to 50 GPa

Уральский Государственный Университет, 620083, Екатеринбург, пр. Ленина, 51

**[O-3] Д.Д. Бадюков, Й. Райтала**

Высокобарные фазы в метеоритах

High-Pressure Phases in Meteorites

Институт геохимии и аналитической химии РАН, 119991, Москва, ул. Косыгина, 19

**[O-4] С.С. Бацанов**

Новый метод нагружения: динамико-статическое сжатие

New Method of Loading: Dynamic/Static Compression

Центр высоких динамических давлений ВНИИФТРИ, 141570, п/о Менделеево, Московской обл.

**[O-5] М.С. Блантер, В.П. Глазков, В.А. Соменков**

Тепловые колебания и полиморфизм металлов

Thermal Vibrations and Polymorphism of Metals

Московская государственная академия приборостроения и информатики, Москва

**[O-6] S.G. Buga, V.D. Blank, G.A. Dubitskiy, K.V. Gogolinskii, V.M. Prokhorov,**

N.R. Serebryanaya, B. Sundqvist, Å. Fransson

Physical Characterization of Crystalline 3D-Polymeric C<sub>60</sub> and C<sub>70</sub> Fullerenes Obtained by High-Pressure-High-Temperature Treatment

Technological Institute for Superhard and Novel Carbon Materials, 142092, Troitsk, Moscow district, Russia

**[O-7] Ю.Г. Бушуев, С.В. Давлетбаева, Т.А. Дубинкина**

Компьютерное моделирование процессов кристаллизации воды

Computer Simulation of Crystallization of Water

ГОУВПО Ивановский гос. химико-технологический университет, 153460, Иваново, пр. Ф. Энгельса, 7

**[O-8] Ю.Ф. Бирюлин, П.Н. Брунков, А.Я. Вуль, А.Т. Дидейкин, Б.Г. Жуков, С.В. Кидалов,**

М.Н. Корытов, А.В. Нашекин, С.И. Розов, З.Г. Царёва, Ф.М. Шахов, М.А. Яговкина

Воздействие динамических давлений на наноуглеродные объекты

Effect of Dynamic Compression on Nanocarbon

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 г. С.-Петербург, Политехническая ул., 26

**[O-9] E. Gregoryanz**

Simple Molecular Systems at High Pressures and Temperatures

Geophys. Lab., Carnegie Institution of Washington, 5251 Broad Branch Road NW, Washington D.C. 20015 USA

**[O-10] М.И. Даунов, И.К. Камилов, С.Ф. Габиров**

О природе "тяжелых" электронов в бесщелевых и узкозонных полупроводниках

CdHgTe *p*-типа по исследованиям электронного транспорта в критической области при высоких давленияхOn the Nature of "Heavy" Electrons in the Zero- and Narrow-Band *p*-Type CdHg

Semiconductors – from the Electronic Transport in the Critical Region under High Pressure

Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94

**[O-11] O. Degtyareva, E. Gregoryanz, H.-K. Mao, R.J. Hemley**

Novel Chain Structures in Group VI Elements

Geophys. Lab., Carnegie Institution of Washington, 5251 Broad Branch Road NW, Washington D.C. 20015 USA

- [O-12] В.Ф. Дегтярева  
Деформация Бейна *гцк–оцк* в бинарных сплавах на основе In и Sn: определяющая роль валентных электронов  
*Fcc–bcc Bain Deformation in Binary In and Sn Alloys: Governing Role of Valence Electrons*  
Институт физики твердого РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [O-13] П.И. Дорогокупец, А.Р. Оганов  
Рубиновый стандарт давления и его альтернативы  
*Ruby Pressure Standard and the Alternatives*  
Институт земной коры СО РАН, 664033, Иркутск
- [O-14] L.S. Dubrovniky, N.A. Dubrovinskaia  
Chemical Reactions at Extreme Conditions: Approaching Earth Major Interface  
Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, 95440 Bayreuth, Germany
- [O-15] Ф.С. Елькин, О.Б. Циок, Л.Г. Хвостанцев  
Кинетика фазовых превращений при высоких давлениях. Тензометрический метод исследования  
*Kinetics of the High-Pressure Transformations. Tensiometric Experimental Technique*  
Институт физики высоких давлений РАН, 142190, г. Троицк Московской обл.
- [O-16] M.I. Eremets, A.G. Gavriliuk, I.A. Trojan, M.Yu. Popov, D.A. Dzivenko, R. Boehler  
Polymeric Nitrogen  
Max Planck Institute für Chemie, Postfach 3060, 55020 Mainz, Germany
- [O-17] И.В. Хомская, В.И. Зельдович, Б.В. Литвинов, Н.П. Пурыгин  
Фазовые превращения и эффекты локализации деформации в сплавах при нагружении сходящимися ударными волнами  
*Phase Transformations and Strain Localization in Alloys Loaded with Convergent Shock Waves*  
Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-170, ул. С. Ковалевской, 18
- [O-18] И.П. Зибров, В.П. Филоненко, С.В. Гармаш, М. Сундберг, П.-Э. Вернер  
Структура фаз высокого давления  $V_2O_5$   
*Structures of the  $V_2O_5$  High-Pressure Phases*  
Институт кристаллографии РАН, 117333, Москва, Ленинский пр., 59
- [O-19] Г.И. Канель, С.В. Разоренов, Г.С. Безручко  
Физика отрицательных давлений: современное состояние и задачи  
*Physics of the Negative Pressures: State-of-the-Art and Problems*  
Институт теплофизики экстремальных состояний ОИВТ РАН, 125412, Москва, ул. Ижорская, 13/19
- [O-20] А.Н. Катруша, О.А. Заневский, С.А. Ивахненко  
Влияние высоких давлений и температур на дефектно-примесный состав монокристалла алмаза  
*High  $P$ – $T$  Treatment Effect on the Defect and Impurity Composition of Diamond Single Crystals*  
Институт сверхтвердых материалов им. В.Н. Бакуля НАНУ, ул. Автозаводская, 2, Киев, 04074, Украина
- [O-21] А.Я. Вуль, В.М. Давиденко, С.В. Кидалов, Ф.М. Шахов, М.А. Яговкина, В.А. Яшин  
Каталитическое влияние фуллеренов на синтез алмазов из графита  
*Catalytic Effect of Fullerenes on Diamond Synthesis from Graphite*  
Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 г. С.-Петербург, Политехническая ул., 26
- [O-22] А.В. Курдюмов, В.Ф. Бритун, Н.И. Боримчук, А.И. Даниленко, В.В. Ярош  
Фазовые превращения разупорядоченных графитоподобных структур при высокотемпературном ударном сжатии  
*Phase Transformation of Disordered Graphite-Like Structures on High-Temperature Shock Compression*  
Инст. проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАНУ, 03680 ул. Кржижановского 3, Киев, Украина



- [O-23] **А.В. Курнос**ов, А.Ю. Манаков, В.Ю. Комаров, В.И. Воронин, А.Е. Теплых, С.В. Горяйнов, А.Ю. Лихачёва  
Клатратные фазы высокого давления в системе тетрагидрофуран – вода. Новый структурный тип клатратных гидратов  
High-Pressure Clathrate Phases in the Tetrahydrofurane – Water System. A New Structural Type of Clathrate Hydrates  
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН, 630090, Новосибирск
- [O-24] М.М. Кириллова, Л.В. Номерованная, А.В. Махнёв, **М.В. Магницкая**, А.В. Цвященко, Л.Н. Фомичева  
Оптические свойства соединения  $\text{CaCO}_2$ , синтезированного при высоком давлении. Эксперимент и теория  
Optic Properties of  $\text{CaCO}_2$  Compound Prepared under High Pressure. Experiment and Theory  
Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, 142190, Московская обл. г. Троицк
- [O-25] **Е.Г. Максимов**, М.В. Магницкая, В.Е. Фортов  
Непростое поведение простых металлов при высоких давлениях  
Non-Simple Behavior of Simple Metals under High Pressure  
Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, 119991, Москва, Ленинский просп. 53
- [O-26] **К.П. Мелетов**, И.О. Башкин  
Энергетический спектр и стабильность гидрида фуллерена  $\text{C}_{60}\text{H}_{36}$  при давлении до 12 ГПа  
Energy Spectrum and Stability of Fullerene Hydride  $\text{C}_{60}\text{H}_{36}$  at Pressures to 12 GPa  
Институт физики твёрдого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [O-27] **А.Ю. Моллаев**, Р.К. Арсланов, Л.А. Сайпулаева, С.Ф. Габибов  
Структурные фазовые переходы в некоторых бинарных полупроводниках при высоком давлении  
Structural Phase Transitions in Some Binary Semiconductors under High Pressure  
Институт физики Дагестанского научного центра НЦ РАН, 367003, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94
- [O-28] **С.В. Овсянников**, В.В. Щенников  
Термомагнитные эффекты в прямозонных полупроводниках в области фазовых переходов под давлением  
Thermomagnetic Effects in Direct-Band Semiconductors in Relation to Phase Transitions under Pressure  
Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-170, ул. С. Ковалевской, 18
- [O-29] **Artem R. Oganov**  
Phase Diagrams of Minerals from *ab initio* Simulations  
Lab. Crystallogr., Dept. of Matls, Swiss Federal Inst. of Technology (ETH) Zurich, CH-8092 Zurich, Switzerland
- [O-30] **Ю.А. Осипьян**  
Фуллерены под высоким давлением  
Fullerenes under High Pressure  
Институт физики твёрдого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [O-31] **В.И. Постнов**, В.Е. Фортов, В.В. Якушев, И.В. Ломоносов, К.Л. Каган, Д.В. Шахрай, В.В. Авдонин  
Электропроводность лития, натрия, кальция и алюминия в условиях ступенчатого сжатия до 2 Мбар  
Conductivity of Lithium, Sodium, Calcium and Aluminium upon Stepped Compression to 2 Mbar  
Институт проблем химической физики РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [O-32] **М.А. Серга**, Ивахненко С.А.  
Стимулирование гетерогенного зародышеобразования при выращивании монокристаллов алмаза в области термодинамической стабильности

Stimulation of Heterogeneous Nucleation for Diamond Single Crystal Growth in the Region of Thermodynamic Stability

Институт сверхтвёрдых материалов им. В.Н. Бакуля НАНУ, ул. Автозаводская, 2, Киев, 04074, Украина

[O-33] **Г.В. Синько**, Н.А. Смирнов

Потеря кристаллом  $\alpha$ -железа механической устойчивости в области отрицательных давлений

Mechanical instability of  $\alpha$ -Fe Crystal at Negative Pressures

РФЯЦ – ВНИИ технической физики, 456770, Снежинск Челябинской обл.

[O-34] **В.Ф. Скородумов**

Статистическая термодинамика плавления полимеров при высоких давлениях

Statistical Thermodynamics for Melting of Polymers under Pressure

Московский государственный текстильный университет им. А.Н.Косыгина, Москва

[O-35] **В.А. Соменков**

Атомные колебания и фазовые переходы при высоких давлениях и температурах

Atomic Vibrations and Phase Transitions at High Pressures and Temperatures

ФГУ РНЦ «Курчатовский институт», 123182, Москва

[O-36] **А.В. Спивак**, С.Н. Шилобреева, Ю.А. Литвин

Формирование алмаза в многокомпонентных карбонат–углеродных средах: граничные условия, кинетика, примесный азот

Diamond Formation in Multi-Component Carbonate–Carbon Media: Boundary Conditions, Kinetics, Nitrogen Impurity

Институт экспериментальной минералогии РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка

[O-37] **В.В. Стегайлов**

Исследование свойств перегретых кристаллов методом молекулярной динамики

Study of Superheated Crystals by Means of Molecular Dynamics

Институт теплофизики экстремальных состояний РАН, 125412 г. Москва, ул. Ижорская, 13/19

[O-38] Е.Б. Долгушева, **В.Ю. Трубицын**, Е.И. Саламатов

Моделирование фазовых переходов в цирконии методом молекулярной динамики

Molecular Dynamics Simulation of Phase Transitions in Zirconium

Физико-технический институт УрО РАН, Ижевск

[O-39] **Р.Ф. Трунин**

Сжатие веществ сверхвысокими давлениями ударных волн

Compression of Substances with Super-High Shock-Wave Pressures

РФЯЦ – ВНИИ экспериментальной физики, 607200, г. Саров, Нижегородская обл., пр. Мира, 37

[O-40] **А.П. Тютюнник**, Н.В. Таракина, В.Г. Зубков, Т.В. Дьячкова, Ю.Г. Зайнулин, Г. Свенссон

Исследование полиморфизма в ниобатах и танталатах  $3d$ -переходных элементов в условиях высоких давлений и температур

Polymorphism of Niobates and Tantalates of  $3d$ -Transition Elements under High Pressure and Temperature

Институт химии твердого тела УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-145, ул. Первомайская, 91

[O-41] Е.А. Козлов, **В.И. Фельдман**, Л.В. Сазонова, Е.В. Сизова, И.В. Белятинская  
Высокобарические минеральные фазы, образующиеся при ударно-волновом нагружении граната

High-Pressure Mineral Phases in Garnet under Shock-Wave Compression

МГУ им. М.В. Ломоносова, геологический факультет, кафедра петрологии, 119899, Москва

- [O-42] **S.M. Filipek**, V. Paul-Boncour, H. Sugiura, R.S. Liu and I. Marchuk  
Properties of Novel Hydrides Synthesized under High Hydrogen Pressures from C15 Laves Phases  
Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sci., ul. Kasprzaka 44/52, 01-224 Warsaw, Poland
- [O-43] **В.П. Филоненко**, И.П. Зибров, С.В. Гармаш, Д.В. Дробот, Е.Е. Никишина  
Новые гидраты тантала: кристаллизация и фазовые превращения при 5.0 ГПа  
New Tantalum Hydrates: Crystallization and Phase Transformations at 5.0 GPa  
Институт физики высоких давлений РАН, 142190, Московская обл. г. Троицк
- [O-44] **Vladimir E. Fortov**  
Liquid- and Crystal-Like Structures in Dusty Plasmas  
Institute for High Energy Densities, Russian Academy of Sciences, 13/19 Izhorskaya, 125412, Moscow
- [O-45] **А.Э. Хейфец**, В.И. Зельдович, Н.Ю. Фролова, Б.В. Литвинов, Н.П. Пурьгин  
Изучение рассеяния ударных волн на микронеоднородностях среды на основе анализа микроскопических особенностей остаточной деформации нагруженных образцов  
Dispersion of Shock Waves in Micro-Inhomogeneous Medium from the Analysis of Microscopic Features of the Residual Strain  
Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-170, ул. С. Ковалевской, 18
- [O-46] **А.В. Цвященко**, Л.Н. Фомичева, М.А. Авила, С.Л. Будько, Р.А. Рибейро, П.К. Кенфилд, К. Петровик  
Синтез диборидов РЗМ при высоком давлении. Магнетизм  $\text{YbB}_2$   
Synthesis of Rare-Earth Diborades under High Pressure.  $\text{YbB}_2$  magnetism  
Институт физики высоких давлений РАН, 142190, Московская обл. г. Троицк
- [O-47] **К.И. Шмулович**  
Флюидные системы при высоких давлениях и температурах  
Fluid Systems at High Pressures and Temperatures  
Институт экспериментальной минералогии РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [O-48] **C. Sanloup**, G. Morard, G. Fiquet, E. Gregoryanz, M. Mezouar  
*In situ* Study of Liquid Fe and Liquid Fe-Alloys under High Pressures  
Laboratoire MAGIE, Université Pierre et Marie Curie (Paris-6), 4 pl. Jussieu, 75252 Paris cedex 05, France

## POSTERS

## СТЕНДЫ

- [P-1] О.Л. Хейфец, **А.Н. Бабушкин**, И.В. Корионов  
Температурные зависимости сопротивления  $\text{AgGeSbS}_3$  при давлениях 10–45 ГПа  
Thermal Dependence of  $\text{AgGeSbS}_3$  Resistivity at Pressures 10 to 45 GPa  
Уральский государственный университет им. А.М. Горького, 620083, Екатеринбург, пр. Ленина, 51
- [P-2] **И.В. Корионов**, А.Н. Трефилова, А.Н. Бабушкин, W. Lojkowski, A. Opalinska  
Релаксационные процессы в диоксиде циркония при высоких давлениях  
Relaxation Processes in Zirconium Dioxide under High Pressure  
Уральский государственный университет им. А.М. Горького, 620083, Екатеринбург, пр. Ленина, 51
- [P-3] О.Л. Хейфец-Кобелева, **А.Н. Бабушкин**, К.Ю. Суханова, Е.С. Флягина, С.Н. Шкерин  
Фазовые переходы в  $\text{AgGeSbS}_{3x}\text{Se}_{3(1-x)}$  ( $x = 0.4-0.6$ ) при давлениях 10–45 ГПа  
Phase Transitions in  $\text{AgGeSbS}_{3x}\text{Se}_{3(1-x)}$  ( $x = 0.4-0.6$ ) at Pressures 10 to 45 GPa  
Уральский государственный университет им. А.М. Горького, 620083, Екатеринбург, пр. Ленина, 51
- [P-4] О.Л. Хейфец-Кобелева, Е.Н. Яковлев, **А.Н. Бабушкин**, V.N. Khabashesku, В.В. Милявский  
Влияние высоких давлений на электрические свойства  $\text{C}_3\text{N}_4$   
Effect of High Pressure on the Electric Properties of  $\text{C}_3\text{N}_4$   
Уральский государственный университет им. А.М. Горького, 620083, Екатеринбург, пр. Ленина, 51

- [P-5] **Ю. К. Товбин**, В. Н. Комаров  
Адсорбционная деформация пористых тел  
Adsorptive Deformation of Porous Solids  
ГНЦ РФ “ НИФХИ им.Л.Я.Карпова”, ул. Воронцово Поле 10, Москва, 105064
- [P-6] **А.П. Шебанин**  
Исследование неупорядоченных состояний SiO<sub>2</sub> методом комбинационного рассеяния света  
Disordered SiO<sub>2</sub> States Studied by Raman Spectroscopy  
Объединенный институт геологии, геофизики и минералогии СО РАН, Новосибирск
- [P-7] **Г.В. Тихомирова**, А.Н. Бабушкин  
Релаксация сопротивления галогенидов аммония в окрестности фазового перехода высокого давления  
Resistivity Relaxation of Ammonium Halides in the Vicinity of High-Pressure Phase Transition  
Уральский государственный университет им. А.М. Горького, 620083, Екатеринбург, пр. Ленина, 51
- [P-8] **Л.Г. Севастьянова**, К.П. Бурдина, М.Г. Жижин, О.К. Гулиш, О.В. Кравченко, М.Е. Леонова, В.К. Генчель  
Синтез и фазовые превращения соединений, образующихся в системах Mg–Sb, Mg–Bi, Mg–B–Sb и Mg–B–Bi  
Synthesis and Phase Transformations of the Compounds Formed in the Mg–Sb, Mg–Bi, Mg–B–Sb and Mg–B–Bi Systems  
Химический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова, 119992, Москва
- [P-9] **В.В. Щенников**, С.В. Овсянников, Г.В. Воронцов, Вс.В. Щенников  
Определение структурных фазовых переходов под давлением различными методами  
Registration of the Structural Phase Transitions under Pressure Using Different Methods  
Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-170, ул. С. Ковалевской, 18
- [P-10] **С.Е. Кичанов**, В.И. Бобровский, В.П. Глазков, Д.П. Козленко, Б.Н. Савенко, В.А. Соменков  
Структурные изменения соединения Sr<sub>1-x</sub>La<sub>x</sub>CuO<sub>2</sub> при высоком давлении  
Structural Changes of Sr<sub>1-x</sub>La<sub>x</sub>CuO<sub>2</sub> under High Pressure  
ЛНФ ОИЯИ, 141980, Дубна, ул. Жолио-Кюри, 6
- [P-11] Е.А. Козлов, **А.В. Добромыслов**, Н.И. Талуц  
Влияние ударных волн на структуру и деформационное поведение армко-железа  
Shock-Wave Effect on Microstructure and Deformation Behavior of Armco-Iron  
Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-170, ул. С. Ковалевской, 18
- [P-12] **Н.И. Талуц**, А.В. Добромыслов, Е.А. Козлов  
Влияние сферически сходящихся ударных волн на структурное и фазовое состояние сплавов циркония с ниобием  
Effect of Convergent Shock Waves on the Structural and Phase State of the Zr–Nb Alloys  
Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-170, ул. С. Ковалевской, 18
- [P-13] **N.A. Dubrovinskaia**, L.S. Dubrovinsky  
External Electrical Heating for the Diamond Anvil Cell: Implication for Investigations of the Structure and Properties of the High-pressure Phases  
Bayerisches Geoinstitut, Universität Bayreuth, 95440 Bayreuth, Germany
- [P-14] **В.Ф. Бритун**, А.В. Курдюмов, И.А. Петруша  
Влияние условий нагружения при статическом сжатии на развитие мартенситных превращений в текстурированных образцах CVD-BN

Shear Stress Effects on the Martensitic Transformations in Textured CVD-BN Samples under Static Pressure

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАНУ, 03680 ул. Кржижановского 3, Киев, Украина

- [P-15] **Е.В. Болдырева**, Е.Н. Колесник, Т.Н. Дребущак, Г.Ахсбах  
Сравнительное исследование влияния давления и температуры на кристаллическую структуру аминокислоты *L*-серина  
Comparison of the Pressure and Temperature Effects on the Amino Acid *L*-Serine Crystal Structure  
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, 630128, Новосибирск, ул. Кутателадзе, 18
- [P-16] **В.К. Федотов**, В.Е. Антонов, Г. Гроссе, Т. Хансен, Б. Хаубак, А.С. Иванов, А.И. Колесников, В.В. Сиколенко, В.Г. Симкин, В.А. Яртысь  
Локализация водорода и дейтерия в  $\beta$ -марганце  
Hydrogen and Deuterium Positions in  $\beta$ -Manganese  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-17] **В.Е. Антонов**, А.И. Латынин, М. Ткач  
Фазовые превращения в системах Mo–D и Mo–H  
Phase Transformations in the Mo–D and Mo–H systems  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-18] В.Е. Антонов, **Т.Е. Антонова**, В.К. Федотов, Т. Хансен, А.И. Колесников, А.С. Иванов  
Нейтронные исследования ГЦК моногидрида кобальта  
Neutron Diffraction Study of FCC Cobalt Monohydride  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-19] **Ю.Г. Бушуев**, С.В. Давлетбаева, Т.А. Дубинкина  
Структурное состояние воды в углеродных нанотрубках и вблизи их внешних поверхностей  
Structural State of Water in Carbon Nanotubes and at the Outer Surface  
ГОУВПО "Ивановский гос. химико-технологический университет", 153460, Иваново, пр. Ф. Энгельса, 7
- [P-20] Г.Е. Абросимова, И.О. Башкин, **О.Г. Рыбченко**, В.Ш. Шехтман  
Структурные особенности ромбоэдрической фазы высокого давления  $C_{60}$   
Structural Features of the High-Pressure Rhombohedral  $C_{60}$  Phase  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-21] А.И. Колюбакин, В.Е. Антонов, **О.И. Баркалов**, А.И. Харкунов  
Транспортные свойства массивного аморфного полупроводника  $(GaSb)_{38}Ge_{24}$   
Transport Properties of Bulk Amorphous Semiconductor  $(GaSb)_{38}Ge_{24}$   
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-22] **Д.В. Башлыков**, И.Г. Бродова, Е.А. Козлов  
Структура и состав алюминидов циркония в сплаве Al–Zr после интенсивного воздействия сферическими ударно-изоэнтропическими волнами  
Structure and Composition of Zirconium Aluminides in the Al–Zr Alloy after Strong Compression in Spherical Isoentropic Shock Wave  
Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-170, ул. С. Ковалевской, 18
- [P-23] **М.И. Даунов**, И.К. Камилов, С.Ф. Габиров  
О трех сценариях электронного фазового перехода металл–изолятор в полупроводниках под давлением  
On Three Scenarios of the Metal–Insulator Electronic Phase Transition in Semiconductors under Pressure  
Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94

- [P-24] **М.И. Даунов, И.К. Камилов, С.Ф. Габиров**  
 Квазибесщелевой полупроводник при высоких давлениях – модель аморфного полупроводника  
 Quasi-Zero-Band Semiconductor under High Pressure – a Model of Amorphous Semiconductor  
 Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94
- [P-25] **Т.В. Дьячкова, Н.И. Кадырова, А.П. Тютюнник, В.Г. Зубков, В.И. Бобровский, Ю.Г. Зайнулин**  
 Синтез сверхпроводящих купратов состава  $Sr_{1-x}A_xCuO_2$  (A - Li, Ca, Ba, Ln;  $0 < x < 1$ ) в условиях высоких давлений и температур  
 Synthesis of Superconducting Cuprates  $Sr_{1-x}A_xCuO_2$  (A - Li, Ca, Ba, Ln;  $0 < x < 1$ ) under High Pressure and Temperature  
 Институт химии твердого тела УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-145, ул. Первомайская, 91
- [P-26] **А.А. Антанович, В.А. Давыдов, А.В. Рахманина, В.П. Филоненко, В. Н. Хабашеску**  
 Синтез и фазовые превращения при высоких давлениях нанопорошка  $C_3N_4$   
 Synthesis and Phase Transformations of  $C_3N_4$  Nano-Powder under High Pressure  
 Институт физики высоких давлений РАН, 142190, Московская обл. г. Троицк
- [P-27] **С.В. Горяйнов, Е.Н. Колесник, Е.В. Болдырева**  
 Фазовый переход в бета-глицине при 0.75 ГПа  
 Phase Transition in beta-Glycine Revealed at 0.75 GPa  
 Институт минералогии и петрографии СО РАН, пр. ак. Коптюга, 3, 630090, Новосибирск
- [P-28] **А. Г. Гаврилюк, С. Г. Овчинников, С.А. Харламова**  
 Скачок энергетической щели в  $GdFe_3(BO_3)_4$  под действием высокого давления  
 Discontinuity of the Energy Gap in  $GdFe_3(BO_3)_4$  under High Pressure  
 Институт физики высоких давлений РАН, 142190, Московская обл. г. Троицк
- [P-29] **Е.В. Болдырева, С.Н. Ивашевская, Г. Сова, Г. Ахсбахс, Г.-П. Вебер**  
 Образование ранее неизвестной полиморфной модификации кристаллического глицина под действием высокого давления  
 A New Polymorphous Modification of Crystalline Glycine Induced due to High Pressure  
 НОЦ “МДЭБТ”, НГУ, 630090 г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2
- [P-30] **С.С. Казанцев, Б.А. Максимов, V. Dmitriev, Н.-Р. Weber, Д.Ю. Пушаровский**  
 Гидростатическое сжатие монокристаллов  $BaBPO_5$  и  $CeBSiO_5$   
 Hydrostatic Compression of  $BaBPO_5$  and  $CeBSiO_5$  Single Crystals  
 Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН, Москва
- [P-31] **В.А. Горельский, И.Е. Хорев, А.А. Рогова, Е.А. Минакова**  
 Экспериментально-теоретическое исследование кинетических механизмов разрушения и фазовых превращений в преградах при ударно-волновом нагружении  
 Experimental and Theoretical Study of the Kinetic Mechanisms of Fracture and Phase Transformations of Shock-Loaded Targets  
 Томский гос. университет систем управления и радиоэлектроники, 634050, Томск, пр. Ленина 40
- [P-32] **И.В. Корольков, Т.В. Дьячкова, С.А. Громилов, К.В. Юсенко, С.В. Коренев, А.П. Тютюнник, Ю.Г. Зайнулин**  
 Получение и исследование фазовых превращений твердого раствора  $Re_{0.3}Ir_{0.7}$   
 Preparation and Study of the Phase Transformations in  $Re_{0.3}Ir_{0.7}$  Solid Solution  
 Институт неорганической химии им. А.В. Николаева РАН, Новосибирск, 630090, пр. Лаврентьева 3
- [P-33] **А.Ю. Лихачёва, С.В. Горяйнов**  
 Устойчивость аммонийного анальцима и натролита при давлениях до 12 ГПа  
 Stability of Ammonium Analcite and Natrolite at Pressures to 12 GPa  
 Институт минералогии и петрографии СО РАН, пр. ак. Коптюга, 3, 630090, Новосибирск

- [P-34] А.Г. Гаврилюк, И.А. Троян, С.Г. Овчинников, **И.С. Любутин**, В.А. Саркисян  
 Подавление сильных электронных корреляций в борате железа  $\text{FeVO}_3$  при высоких давлениях  
 Depression of Strong Electron Correlations in  $\text{FeVO}_3$  at High Pressures  
 Институт кристаллографии РАН, 119333, Москва, Ленинский пр-т, 59
- [P-35] **A.S. Mikhaylushkin**, S.I. Simak, S. Lidin, U. Häussermann  
 Electron Concentration and Pressure Induced Structural Changes in Alloys  $\text{In}_{1-x}\text{M}_x$  ( $\text{M} = \text{Cd}, \text{Sn}$ )  
 Department of Inorganic Chemistry, Stockholm University, S-106 91 Stockholm, Sweden
- [P-36] А.Ю. Моллаев, И.К. Камиллов, **Р.К. Арсланов**, У.З. Залибеков, С.Ф. Маренкин, В.М. Новоторцев, С.Г. Михайлов  
 Фазовые переходы в магнитных полупроводниках  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{GeAs}_2$  и  $\text{Cd}_{1-x}\text{Gr}_x\text{GeAs}_2$  при гидростатических давлениях до 9 ГПа  
 Phase Transitions in Magnetic Semiconductors  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{GeAs}_2$  and  $\text{Cd}_{1-x}\text{Gr}_x\text{GeAs}_2$  at Hydrostatic Pressures to 9 GPa  
 Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94
- [P-37] А.Ю. Моллаев, Р.К. Арсланов, **Л.А. Сайпулаева**, А.Н. Бабушкин, Т.С. Лях, С.В. Татур, С.Ф. Маренкин, А.Ю. Вольфович  
 Фазовые превращения в диарсениде цинка при высоком давлении до 50 ГПа  
 Phase Transitions in  $\text{ZnAs}_2$  at Pressures to 50 GPa  
 Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94
- [P-38] А.Ю. Моллаев, Р.К. Арсланов, **Р.Г. Джамамедов**, С.Ф. Маренкин, С.А. Варнавский  
 Фазовые переходы на ориентированных монокристаллах  $p\text{-CdSb}$  при высоких гидростатических давлениях  
 Phase Transitions in Oriented  $p\text{-CdSb}$  Single Crystals at Hydrostatic Pressures  
 Институт физики Дагестанского научного центра РАН, 367003, Махачкала, ул. М. Ярагского, 94
- [P-39] **С. Н. Шевчук**, А. А. Будяк, С. А. Ивахненко  
 Компьютерное моделирование распределения температурных и концентрационных полей при выращивании монокристаллов алмаза различного габитуса  
 Computer Simulation of the Thermal and Concentration Fields for Growth of Diamond Single Crystals with Different Habitus  
 Институт сверхтвердых материалов им. В.Н. Бакуля НАНУ, ул. Автозаводская, 2, Киев, 04074, Украина
- [P-40] А.В. Цвященко, Л.Н. Фомичева, **Е.Н. Ширани**, Д.В. Философов, А.В. Саламатин, О.И. Кочетов, В.А. Бруданин  
 Градиент электрического поля в орторомбической фазе высокого давления  $\text{HfO}_2$   
 Electric Field Gradient in the Orthorhombic High-Pressure Phase of  $\text{HfO}_2$   
 Институт физики высоких давлений РАН, 142190, Московская обл. г. Троицк
- [P-41] **Ю.М. Шульга**, В.М. Мартыненко, С.А. Баскаков, В.И. Петин, Д.В. Щур  
 Кавитационное давление как фактор уплотнения фуллерита  $\text{C}_{60}$  при его осаждении из раствора  
 Cavitation Pressure as a Factor for Density Increase of  $\text{C}_{60}$  Fullerite Precipitating from Solution  
 Институт проблем химической физики РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-42] **О.В. Сидоров**  
 Переход в упорядоченное состояние апротонных растворов ароматических бензимидазолов при высоких давлениях  
 High-Pressure Ordering Transitions in Aprotic Aromatic Benzimidazoles  
 Московский государственный текстильный университет им. А.Н. Косыгина

- [P-43] **S.G. Titova**, N.V. Toporova, Yasuo Ohishi  
Negative Thermal Expansion in HTSC Hg-Based Compound under High Pressure  
Institute of Metallurgy UrD RAS, 620016, Ekaterinburg
- [P-44] С.А. Останин, **В.Ю. Трубицын**, С.Ю. Саврасов  
Структурная стабильность фосфора при высоких давлениях  
Structural Stability of Phosphorus at High Pressures  
Физико-технический институт УрО РАН, 426001, Ижевск, Кирова, 132
- [P-45] **В.Ю. Трубицын**  
Расчет температурных особенностей взаимодействия двух ангармонических мод циркония  
Calculation of Thermal Behavior of Two Interacting Anharmonic Modes in Zirconium  
Физико-технический институт УрО РАН, 426001, Ижевск, Кирова, 132
- [P-46] А.В. Цвященко, **Л.Н. Фомичева**, Г.К. Рясный, Б.А. Комиссарова, А.А. Сорокин  
Изучение устойчивости сосуществования двух зарядовых состояний рутения при замещении Ce и Ru в магнитном сверхпроводнике CeRu<sub>2</sub>, синтезированном при высоком давлении  
A Study of the Stability of Two Electronic States of Ruthenium Coexisting in CeRu<sub>2</sub> Magnetic Superconductor Prepared under High Pressure upon Ce or Ru Substitution  
Институт физики высоких давлений РАН, 142190, Московская обл. г. Троицк
- [P-47] **L. Chudinovskikh**, R. Boehler  
Detection of the Mg-Si-Perovskite Phase Boundaries in the Laser-Heated Diamond Cell: Advances and Difficulties  
Max-Planck-Institut für Chemie, Postfach 3060, 55020 Mainz, Germany
- [P-48] **В.П. Яшников**  
О морфологических превращения при миграции и фасетирования межзеренных границ и их тройных сопряжений  
On the Morphological Transformations at Migration and Faceting of the Intergrain Boundaries and Their Triple Conjunctions  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-49] **И.О. Башкин**, В.Е. Антонов, А.В. Баженов, И.К. Бдикин, Д.Н. Борисенко, И.В. Кондратьева, Е.П. Криничная, А.П. Моравский, Ю.А. Осипьян, Е.Г. Понятовский, Т.Н. Фурсова, А.И. Харкунов, Ю.М. Шульга  
Взаимодействие водорода с углеродными наноматериалами под высоким давлением  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Черноголовка, Московская обл.
- [P-50] **В.И. Зельдович**, Н.Ю. Фролова, А.Э. Хейфец, Б.В. Литвинов, Н.П. Пурьгин  
Высокоскоростная деформация стали в сходящихся ударных волнах  
High-Rate Deformation of Steel in Convergent Shock Waves  
Институт физики металлов УрО РАН, 620219, Екатеринбург, ГСП-170, ул. С. Ковалевской, 18
- [P-51] **В.В. Сеницын**, В.П. Дмитриев, Д. Махон, Б.С. Редькин, Х.–П. Вебер, Е.Г. Понятовский  
Аморфизация и фазовые переходы в Eu<sub>2</sub>(MoO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> при высоком давлении  
Amorphization and Phase Transitions in Eu<sub>2</sub>(MoO<sub>4</sub>)<sub>3</sub> at High Pressures  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-52] **В.Я. Терновой**, С.В. Квитов, А.А. Пяллинг, А.С. Филимонов, В.Е. Фортов  
Экспериментальное определение условий перехода в проводящее состояние атмосферы Юпитера  
Experimental Determination of Conditions for Transition of the Jupiter Atmosphere to the Conducting State  
Институт проблем химической физики РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка



- [P-53] Д.А. Азарова, А.С. Зелепугин, С.А. Зелепугин, О.В. Иванова  
Численное моделирование поведения смеси медь–углерод при ударно-волновом нагружении  
Numerical Simulation of the Shock-Wave Compression Behavior of the Copper–Carbon Mixture  
Отдел структурной макрокинетики ТНЦ СО РАН, Томск, 634021, Томск, пр. Академический, 10/3
- [P-54] Ю.Б. Кудасов, А.С. Коршунов  
Металлизация конденсированной фазы инертного газа с примесями при высоких давлениях  
High-Pressure Metallization of the Condensed Phase of Admixed Inert Gas  
РФЯЦ – ВНИИ экспериментальной физики, пр. Мира, 37, г. Саров, Нижегородская обл., 607188
- [P-55] Н.Г. Спицына, А.А. Лобач, А.Д. Дубровский, М.Г. Каплунов, И.В. Кондратьева, И.О. Башкин  
Спектральные исследования влияния давления и температуры на продукты фазовых превращений молекулярных комплексов фуллерена C<sub>60</sub>  
Spectroscopic Study of the Pressure and Temperature Effect on the Products of Phase Transformations in C<sub>60</sub> Molecular Complexes  
Институт проблем химической физики РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-56] В.Г. Тиссен, Т.Е. Антонова, И.О. Башкин, М.В. Нефедова, Е.Г. Понятовский  
Структурные переходы и сверхпроводимость сплавов Zr под давлением  
Structural Transitions and Superconductivity of the Zr Alloys under pressure  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-57] Э.С. Персиков, П.Г. Бухтияров  
Влияние состава флюида на процессы плавления кальцита и доломита при высоких давлениях  
Effect of the Fluid Composition on Melting of Calcite and Dolomite under High Pressure  
Институт экспериментальной минералогии, 142432, Московская обл., Черноголовка
- [P-58] Б. К. Пономарёв, И. В. Кулешов, Б. С. Редькин  
Аномалии электрической поляризации в молибдате тербия при гидростатическом давлении до 18 кбар и температуре до 290°C  
Electric Polarization Anomalies in Terbium Molybdate at Hydrostatic Pressures to 18 kbar and Temperatures to 290°C  
Институт физики твёрдого тела РАН, 142432, Черноголовка, Московская обл.
- [P-59] О.А. Когтенкова, С.Г. Протасова, Б.Б. Страумал, Г. Лопес  
Фазовые переходы смачивания границ зерен в алюминии расплавом (Zn,Al)  
Grain Boundary Wetting Phase transitions in Aluminum with (Zn,Al) Melt  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Черноголовка, Московская обл.
- [P-60] А.С. Хрущева, В.Г. Сурсаева, Б.Б. Страумал  
Фазовые переходы смачивания границ зерен в цинке расплавом (Al,Zn)  
Grain Boundary Wetting Phase transitions in Zinc with (Zn,Al) Melt  
Институт физики твердого тела РАН, 142432, Черноголовка, Московская обл.
- [P-61] В.В. Straumal, G.A. López and A.S. Khruzhcheva  
Grain Boundary Phase Transition “Wetting by Solid State” in Zn–Al Alloys  
Institute of Solid State Physics RAS, 142432, Chernogolovka, Moscow district
- [P-62] T. Palasyuk and M. Tkacz  
Pressure Induced Phase Transformation in Erbium Trihydride  
Institute of Physical Chemistry, Polish Academy of Sci., ul. Kasprzaka 44/52, 01-224 Warsaw, Poland

**АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ****AUTHOR INDEX**

Абросимова, Галина Евгеньевна, ИФТТ РАН, Черноголовка <gea@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-20
Авдонин Владимир Владимирович, ИПХФ РАН, Черноголовка <kagan@icp.ac.ru>	O-31
Азарова Дарья Александровна, ОСМ ТНЦ СО РАН, Томск <dasha@tbism..tomsk.ru>	P-53
Антанович Александр Александрович, ИФВД РАН, Троицк <antanov@hppi.troitsk.ru>	P-26
Антонов Владимир Евгеньевич, ИФТТ РАН, Черноголовка <antonov@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-16; P-17; P-18; P-21; P-49
Антонова Татьяна Евгеньевна, ИФТТ РАН, Черноголовка <antonov@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-18; P-56
Арсланов Расул Качалаевич, ИФ ДНЦ РАН, Махачкала <mollaev@datacom.ru>; Факс: (8722)628900 Тел.: (8722)629322	O-27; P-36; P-37; P-38
Бабушкин Алексей Николаевич, УрГУ, Екатеринбург <alexey.babushkin@usu.ru>; Тел.: (343)-261-60-58	O-2; P-1; P-2; P-3; P-4; P-7; P-37
Бадюков Дмитрий Дмитриевич, ГЕОХИ РАН, Москва <badyukov@geokhi.ru>; Факс: (095)-938-20-54; Тел.: (095)-939-70-03	O-3
Баженов Анатолий Викторович, ИФТТ РАН, Черноголовка <bazhenov@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-49
Баркалов Олег Игоревич, ИФТТ РАН, Черноголовка <barkalov@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701 Тел.: (095) 993-27-55	P-21
Баскаков Сергей Александрович, ИПХФ РАН, Черноголовка <shulga@icp.ac.ru>	P-41
Башкин Игорь Олегович, ИФТТ РАН, Черноголовка <bashkin@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	O-26; P-20; P-49; P-55; P-56
Башлыков Денис Владимирович, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <bashlikov@imp.uran.ru>; Факс: (343) 374-52-44; Тел: (343) 378-36-11	P-22
Бацанов Степан Сергеевич, Центр ВДД ВНИИФТРИ, Менделеево, Мос. обл. <batsanov@gol.ru>; Факс: (095)-370-8758; Тел.: (095)-370-8758	O-4
Бдикин Игорь Корнеевич, ИФТТ РАН, Черноголовка <bdikin@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-49
Безручко Галина Сергеевна, ИПХФ РАН, Черноголовка <bezgs@ficp.ac.ru>	O-19
Белятинская Ирина Валерьевна, Геофак МГУ, Москва	O-41
Бирюлин Юрий Федорович, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <Biruylin@mail.ioffe.ru>	O-8
Бланк Владимир Давыдович, ФГУ “ТИСНУМ”, Троицк <blank@ntcstm.troitsk.ru>; Факс: (095)-330-99-60, Тел.: (095)-334-08-55	O-6

Блантер Михаил Соломонович, ФГУ РНЦ «Курчатовский институт», Москва <mike@blanter.msk.ru>; Факс: (095)-196-99-08; Тел.: (095)-196-99-08	<b>O-5</b>
Бобровский Владимир Иванович, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <bobrovskii@imp.uran.ru>	P-10; P-25
Болдырева Елена Владимировна, ИХТТИМ СО РАН; НОЦ МДЭБТ НГУ, Новосибирск <boldyrev@nsu.ru>; <elena@xray.nsu.ru>; Факс: 3832-322847; Тел. 3832-397238; тел./факс 3832-397845	<b>P-15</b> ; P-27; P-29
Боримчук Николай Иванович, ИПМ НАНУ, Киев <otdel20@i.com.ua>	O-22
Борисенко Дмитрий Николаевич, ИФТТ РАН, Черногловка <bdn@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-49
Бродова Ирина Григорьевна, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <brodova@imp.uran.ru>	P-22
Бритун Виктор Федорович, ИПМ НАНУ, Киев, Украина <britun@i.com.ua>; Тел.: (380 44) 424-34-01	O-22; <b>P-14</b>
Бруданин Виктор Борисович, ОИЯИ, Дубна <brudanin@nusun.jinr.ru>	P-40
Брунков Павел Николаевич, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <Brunkov@mail.ioffe.ru>	O-8
Буга Сергей Геннадьевич, ФГУ «ТИСНУМ», Троицк, Моск. обл. <buga@ntcstm.troitsk.ru>; Факс: (095)-330-99-60; Тел.: (095)-334-08-55	<b>O-6</b>
Будько Сергей Лиокадиевич, Ames Laboratory, Ames, USA <budko@ameslab.gov>	O-46
Будяк Александр Ананьевич, ИСМ НАНУ, Киев, Украина	P-39
Бурдина Клавдия Петровна, Химфак МГУ, Москва <b.bulychev @ highp.msk.ru>	P-8
Бухтияров Павел Гаврилович, ИЭМ РАН, Черногловка <pavel@iem.ac.ru>	P-57
Бушуев Юрий Гениевич, ГОУВПО ИГХТУ, Иваново <bushuev@isuct.ru>; <bushuev@hotmail.ru>; Тел.: +79023195102	<b>O-7</b> ; <b>P-19</b>
Варнавский С.А., ИОНХ РАН, Москва <marenkin@rambler.ru>	P-38
Волкова Яна Юрьевна, УрГУ, Екатеринбург <yana.volkova@usu.ru>; Факс: (343) 261 68 85 Тел.: (343) 261 74 41	O-2
Вольфович А.Ю., ИОНХ РАН, Москва <marenkin@rambler.ru>	P-37
Воронин Владимир Иванович, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <voronin@imp.uran.ru>	O-23

Воронцов Григорий Вячеславович, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <sergey_v_o@imp.uran.ru>	P-9
Вуль Александр Яковлевич, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <AlexanderVul@mail.ioffe.ru>; Fax: +7 (812) 247 00 73 Тел.: +7 (812) 247 91 07	<b>O-8</b> ; O-21
Габибов Сейфулла Фазилович, ИФ ДагНЦ РАН, Махачкала <mollaev@datacom.ru>	O-10; O-27; P-23; P-24
Гаврилюк Александр Г., ИФВД РАН, Троицк <alexg@ns.hppi.troitsk.ru>; <gavriliuk@mail.ru>	O-16; P-28; P-34
Гармаш Светлана Владимировна ИК РАН, Москва <public@mechan.incr.msk.su>; <public@mechan.incrys.su>	O-18; O-43
Генчель Владимир Константинович, Химфак МГУ, Москва <b.bulychev@highp.msk.ru>	P-8
Глазков Виктор Павлович, ФГУ РНЦ «Курчатовский институт», Москва <glazkov@isssp.kiae.ru>	O-5; P-10
Гоголинский Кирилл Валериевич, ФГУ «ТИСНУМ», Троицк <nanoscan@mtu-net.ru>	O-6
Горельский Василий Алексеевич, ТУСУР, Томск <gorelski@ismtb.tomsk.ru>	P-31
Горяинов Сергей Владимирович, ИМП СО РАН, Новосибирск svg@uiggm.nsc.ru; Факс: (3832)-332792; Тел.: (3832)-332406	O-23; <b>P-27</b> ; P-33
Громилов Сергей Александрович, ИНХ СО РАН, Новосибирск <grom@che.nsk.su>	P-32
Гулиш Ольга Константиновна, Химфак МГУ, Москва <b.bulychev@highp.msk.ru>	P-8
Давиденко Владимир Михайлович, АООТ «Абразивный завод «Ильич», Санкт-Петербург	O-21
Давлетбаева Светлана Владимировна, ИХР РАН, Иваново <bushuev@isuct.ru>	O-7; P-19
Давыдов Валерий Александрович, ИФВД РАН, Троицк, Мос. обл. <vdavydov@hppi.troitsk.ru>	P-26
Даниленко Анатолий Иванович, ИПМ НАНУ, Киев, Украина <otdel20@i.com.ua>	O-22
Даунов Менаш Иосифович, ИФ ДагНЦ РАН, Махачкала <mollaev@datacom.ru>; Факс: (8722)628900; Тел.: (8722)628900	<b>O-10</b> ; P-23; P-24
Дегтярева Валентина Феогниева, ИФТТ РАН, Черноголовка <degtyar@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: 095) 993-27-55	O-12
Джамамедов Рамиз Гаджимедович, ИФ ДНЦ РАН, Махачкала <mollaev@datacom.ru>; Факс: (8722)628900; Тел.: (8722)629322	P-38
Дидейкин Артур Ториевич, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <Dideikin@mail.ioffe.ru>	O-8

Добромыслов Аркадий Васильевич, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <dobromyslov@imp.uran.ru>; Факс: (343)-374-52-44; Тел.: (343)-378-38-24	<b>P-11; P-12</b>
Долгушева Елена Борисовна, ФТИ УрО РАН, Ижевск	<b>O-38</b>
Дорогокупец Петр Иванович, ИЗК СО РАН, Иркутск <dor@crust.irk.ru>; Факс: (395)-242-69-00; Тел.: (395)-251-16-80	<b>O-13</b>
Дребушак Татьяна Николаевна, ИХТТИМ СО РАН, НОЦ “МДЭБТ” НГУ, Новосибирск <tanya@xray.nsu.ru>; Факс: 3832-322847; Тел. 3832-397238	<b>P-15</b>
Дробот Дмитрий Васильевич, МГАТХТ, Москва <deol@tetran.ru>	<b>O-43</b>
Дубинкина Татьяна Александровна, ГОУВПО «ИГАСА», Иваново	<b>O-7; P-19</b>
Дубицкий Геннадий Александрович, ФГУ “ТИСНУМ”, Троицк <dga@ntcstm.troitsk.ru>	<b>O-6</b>
Дубровский Александр Димитриевич, ИПХФ РАН, Черноголовка	<b>P-55</b>
Дьячкова Татьяна Витальевна, ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург <dyachkova@ihim.uran.ru>; Факс: (3432)-74-44-95; Тел.: (3432)-49-35-25	<b>O-40; P-25; P-32</b>
Елькин Федор Сергеевич, ИФВД РАН, Троицк, Мос. обл. <feodor@hppi.troitsk.ru>; Факс: (095)-334-00-12; Тел.: (095)-334-08-03	<b>O-15</b>
Жижин Михаил Григорьевич, Химфак МГУ, Москва <b.bulychev@highp.msk.ru>	<b>P-8</b>
Жуков Борис Георгиевич, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <Bgzhukov@mail.ioffe.ru>	<b>O-8</b>
Залибеков Уллубий Залибекович, ИФ ДНЦ РАН, Махачкала <mollaev@datacom.ru>	<b>P-36</b>
Зайнулин Юрий Галиулович, ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург <zaynulin@ihim.uran.ru>	<b>O-40; P-25; P-32</b>
Заневский Олег Алексеевич, ИСМ НАНУ, Киев, Украина <sioz@ismv13.kiev.ua>	<b>O-20</b>
Зелепугин Алексей Сергеевич, ОСМ ТНЦ СО РАН, Томск <lex@tbism.tomsk.ru>	<b>P-53</b>
Зелепугин Сергей Алексеевич, ОСМ ТНЦ СО РАН, Томск <szel@tbism.tomsk.ru>; Факс: (3822)-49-28-38; Тел.: (3822)-49-22-94	<b>P-53</b>
Зельдович Виталий Ильич, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <zeldovich@imp.uran.ru>; Факс: (343)-374-52-44; Тел.: (343)-378-35-54	<b>O-17; O-45; P-50</b>
Зибров Игорь Петрович, ИК РАН, Москва <zibrov@ns.crys.ras.ru>; Факс: (095)-135-10-11; Тел.: (095)-334-24-83	<b>O-18; O-43</b>
Зубков Владимир Георгиевич, ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург <zubkov@ihim.uran.ru>	<b>O-40; P-25</b>
Иванов Александр Сергеевич, ИЛЛ, Гренобль, Франция <ivanov@ill.fr>	<b>P-16; P-18</b>

Иванова Оксана Владимировна, ОСМ ТНЦ СО РАН, Томск <bliz3@yandex.ru>	P-53
Ивахненко Сергей Алексеевич, ИСМ НАНУ, Киев, Украина <sioz@ismv13.kiev.ua>; <serg@ism13.kiev.ua>	O-20; O-32; P-39
Ивашевская Светлана Николаевна, НОЦ “МДЭБТ” НГУ, Новосибирск; ИГ КарНЦ РАН, Петрозаводск <sveta@xray.nsu.ru>; Факс: (3832)397845; Тел.: (3832)397238	<b>P-29</b>
Каган Ким Леонидович, ИПХФ РАН, Черноголовка <kagan@icp.ac.ru>	O-31
Кадырова Надежда Ивановна, ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург <kadyrova@ihim.uran.ru>	P-25
Казанцев Сергей Сергеевич, ИК РАН, Москва <Kaiser@ints.ru>; Факс: (095)1355220; Тел.: (095)1353110	<b>P-30</b>
Камилов Ибрагимхан Камилович, ИФ ДагНЦ РАН, Махачкала <kamilov@datacom.ru>; Факс: (8722)628900; Тел.: (8722)628900	O-10; P-23; <b>P-24</b> ; P-36
Канель Геннадий Исаакович, ИТЭС ОИВТ РАН, Москва <kanel@fcr.ac.ru>; Факс: (095)-4857990; Тел.: (095)-4832295	<b>O-19</b>
Каплунов Михаил Гершович, ИПХФ РАН, Черноголовка <kaplunov@icp.ac.ru>	P-55
Катруша Андрей Николаевич, ИСМ НАНУ, Киев, Украина <akat@bigmir.net>; Факс: + 38 044 432 95 29; Тел.: + 38 044 463 99 51	<b>O-20</b>
Квитов Сергей Викторович, ИПХФ РАН, Черноголовка <sv@fcr.ac.ru>	P-52
Кидалов Сергей Викторович, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <kidalov@mail.ioffe.ru>; Факс: +7 (812) 247 00 73; Тел.: +7 (812) 247 93 77	O-8; O-21
Кириллова Маргарита Михайловна, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <kirillova@imp.uran.ru>	O-24
Кичанов Сергей Евгеньевич, ЛНФ ОИЯИ, Дубна <ekich@nf.jinr.ru>; Факс: 8-09621-65882; Тел.: 8-09621-63783	P-10
Когтенкова Ольга Александровна, ИФТТ РАН, Черноголовка <koololga@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	<b>P-59</b>
Козленко Денис П., ЛНФ ОИЯИ, Дубна <denk@nf.jinr.ru>	P-10
Козлов Евгений Александрович, РФЯЦ ВНИИТФ, Снежинск <Kozlov@gdd.ch 70.chel.su>	O-41; P-11; P-12; P-22
Колесник Евгения Николаевна, НГУ, НОЦ “МДЭБТ” НГУ, Новосибирск <kolesnik@xray.nsu.ru>; <kolesnik@ngs.ru>; тел./факс 3832-397845	P-15; P-27
Колесников Александр Иванович, ИФТТ РАН, Черноголовка <akolesnikov@anl.gov>	P-16; P-18
Колубакин Анатолий Иванович, ИФТТ РАН, Черноголовка <kolyubak@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-21

Комаров Владимир Николаевич, ГНЦ РФ “НИФХИ им. Карпова”, Москва <tovbin@cc.nifhi.ac.ru>	P-5
Комаров Владислав Юрьевич, ИНХ СО РАН, Новосибирск <komarov_v_y@ngs.ru>	O-23
Комиссарова Берта Андреевна, НИИЯФ МГУ, Москва <vak@srdlan.npi.msu.su>	P-46
Кондратьева Ирина Владимировна, МГУ, Москва <irin_kon@fromru.com>; <irin_kon@atrus.ru>	P-49; P-55
Коренев Сергей Васильевич, ИНХ СО РАН, Новосибирск <yusenko@che.nsk.su>	P-32
Корионов Илья Валерьянович, УрГУ, Екатеринбург <korionov-2002@yandex.ru>; Тел.: (3432)-61-74-41	P-1; P-2
Корольков Илья Викторович, ИНХ СО РАН, Новосибирск <kiv@mail333.com>; Факс: (383-2)-34-44-89; Тел.: (383-2)-34-44-66	P-32
Корытов М.Н., ФТИ РАН, Санкт-Петербург	O-8
Кочетов Олег Иванович, ОИЯИ, Дубна <kochet@nusun.jinr.ru>	P-40
Кулешов Игорь Викторович, ИФТТ РАН, Черногловка	P-58
Коршунов Алексей Сергеевич, РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров	P-54
Криничная Елена Павловна, ИПХФ РАН, Черногловка <elkrina@icp.ac.ru>	P-49
Кудасов Юрий Бориславович, РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров <kudasov@ntc.vniief.ru>; Факс: (83130)-45384; Тел.: (83130)-45584	P-54
Курдюмов Александр Вячеславович, ИПМ НАНУ, Киев, Украина <otdel20@i.com.ua>; Тел.: (380 44) 424-34-01	O-22; P-14
Курносков Александр Владимирович, ИНХ СО РАН, Новосибирск <kurnosov@ngs.ru>; Факс: (3832)-34-44-89; Тел.: (095)-39-13-46	O-23
Латынин Андрей Иванович, ИФТТ РАН, Черногловка	P-17
Леонова Мария Евгеньевна, Химфак МГУ, Москва <b.bulychev @ highp.msk.ru>	P-8
Литвин Юрий Андреевич, ИЭМ РАН, Черногловка <litvin@iem.ac.ru>	O-36
Литвинов Борис Васильевич, РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск <lit@kbone.ch70.chel.su>	O-17; O-45; P-50
Лихачёва Анна Юрьевна, ИМП СО РАН, Новосибирск <alih@uiggm.nsc.ru>; Факс: (3832)-33-27-92; Тел.: (3832)-33-24-06	O-23; P-33
Лобач Анна Анатольевна, РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва <lobach@icp.ac.ru>	P-55

Ломоносов Игорь Владимирович, ИПХФ РАН, Черноголовка <ivl143@icp.ac.ru>	O-31
Любутин Игорь Савельевич, ИК РАН, Москва <lyubutin@ns.crys.ras.ru>; Факс: (095)-135-10-11; Тел.: (095)-135-62-50	<b>P-34</b>
Лях, Т.С., УрГУ, Екатеринбург <Alexey.Babushkin@usu.ru>	P-37
Магницкая Мария Викторовна, ИФВД РАН, Троицк, Мос. обл. <mvm@hppi.troitsk.ru>; Факс: (095)-334-00-12; Тел.: (095)-334-08-09	<b>O-24; O-25</b>
Максимов Борис Алексеевич, ИК РАН, Москва <Maximov@ns.crys.ras.ru>	P-30
Максимов Евгений Григорьевич, ФИАН, Москва <maksimov@lpi.ru>; Факс: (095)-135-85-33; Тел.: (095)-135-75-11	<b>O-25</b>
Манакон Андрей Юрьевич, ИНХ СО РАН, Новосибирск <manakov@che.nsk.su>	O-23
Маренкин Сергей Федорович, ИОНХ РАН, Москва <marenkin@rambler.ru>	P-36; P-37; P-38
Мартыненко Вячеслав Михайлович, ИПХФ РАН, Черноголовка <shulga@icp.ac.ru>	P-41
Махнёв Александр Афанасьевич, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <Almakhnev@imp.uran.ru>	O-24
Мелетов Константин Павлович, ИФТТ РАН, Черноголовка <mele@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	<b>O-26</b>
Милявский, В.В., ИТЭС РАН, Москва	
Минакова, Е.А., ТУСУР, Томск	P-31
Михайлов Сергей Геннадьевич, ИОНХ РАН, Москва <marenkin@rambler.ru>	P-36
Моллаев Ахмедбек Юсуфович, ИФ ДНЦ РАН <mollaev@datacom.ru>; Факс: (8722)628900; Тел.: (8722)629322	<b>O-27; P-36; P-37; P-38</b>
Моравский Александр Петрович, ИПХФ РАН, Черноголовка <moravsky@mercpr.com>	P-49
Нарыгина О.В., УрГУ, Екатеринбург	O-2
Нащекин Алексей Викторович, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <Nashchekin@mail.ioffe.ru>	O-8
Нефедова Марина Воцлавовна, ИФТТ РАН, Черноголовка <tissen@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-56
Никишина Елена Евгеньевна, МГАТХТ, Москва <deol@tetran.ru>	O-43
Новоторцев Владимир Михайлович, ИОНХ РАН, Москва <vmnov@igic.ras.ru>	P-36



Номерованная Лариса Викторовна, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <nomerov@imp.uran.ru>	O-24
Образцова Елена Дмитриевна, ИОФ АН, Москва <elobr@kapella.gpi.ru>	O-2
Овсянников Сергей Владимирович, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <sergey_v_o@imp.uran.ru>; Тел. 343 3783545	<b>O-28</b> ; P-9
Овчинников Сергей Геннадьевич, ИФ СО РАН, Красноярск <sgo@iph.krasn.ru>	P-28; P-34
Оганов Артем Ромаевич (Oganov Artem R.), ETH Zurich <a.oganov@mat.ethz.ch>; Fax: +41-1-632-1133; Тел.: +41-1-632-3752	O-13; <b>O-29</b>
Осипьян Юрий Андреевич, ИФТТ РАН, Черногоровка <ossipyuan@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	<b>O-30</b> ; P-49
Останин Сергей Александрович, University College London, UK	P-44
Персиков Эдуард Сергеевич, ИЭМ РАН, Черногоровка <persikov@iem.ac.ru>; Факс: 8-(252)-46-205; Телефон: 2-58-42	<b>P-57</b>
Петинов Владимир Иванович, ИПХФ РАН, Черногоровка <petinov@icp.ac.ru>	P-41
Петруша Игорь Андреевич, ИСМ НАНУ, Киев, Украина	P-14
Пономарев Борис Константинович, ИФТТ РАН, Черногоровка <ponom@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	<b>P-58</b>
Понятовский Евгений Генрихович, ИФТТ РАН, Черногоровка <ponyatov@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-49; P-51; P-56
Постнов Виктор Иванович, ИПХФ РАН, Черногоровка <postnov@icp.ac.ru>; Факс: 785-70-29; Тел.: 2-10-49, 2-72-25	<b>O-31</b>
Протасова Светлана Георгиевна, ИФТТ РАН, Черногоровка <sveta@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-59
Прохоров Вячеслав Максимович. ФГУ “ТИСНУМ”, Троицк <pvm@ntestm.troitsk.ru>	O-6
Пурыгин Николай Петрович, РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск <shor@gdd.ch70.chel.su>	O-17; O-45; P-50
Пушаровский Дмитрий Юрьевич, Геофак МГУ, Москва <dmitr@geol.msu.ru>	P-30
Пяллинг Алексей Андреевич, ИПХФ РАН, Черногоровка <pyal@icp.ac.ru>	P-52
Разоренов Сергей Владимирович, ИПХФ РАН, Черногоровка <razsv@icp.ac.ru>	O-19
Рахманина Александра Викторовна, ИФВД РАН, Троицк, М.О. <rakhman@hppi.troitsk.ru>	P-26
Редькин Борис Сергеевич, ИФТТ РАН, Черногоровка <redkin@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-51; P-58

Рогова А.А., ТУСУР, Томск	P-31
Розов Сергей Иосифович, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <Sirozov@mail.ioffe.ru>	O-8
Рыбченко Оксана Геннадьевна, ИФТТ РАН, Черноголовка <orybch@issp.ac.ru>; Факс: (096)-524-97-01; Тел.: (096)-522-53-26	<b>P-20</b>
Рясный Геннадий Константинович, НИИЯФ МГУ, Москва <sorokin@srdlan.npi.msu.su>	P-46
Савенко Б.Н., ЛНФ ОИЯИ, Дубна <Savenko@nf.jinr.ru>	P-10
Саврасов Сергей Юрьевич, Dept. Phys., New Jersey Inst. Technol., Newark, New Jersey, USA	P-44
Сазонова Людмила Вячеславовна, Геофак МГУ, Москва <saz@geol.msu.ru>	O-41
Сайпулаева Луиза Абдурахмановна, ИФ ДНЦ РАН, Махачкала <mollaev@datasom.ru>; Факс: (8722)628900; Тел.: (8722)629322	O-27; <b>P-37</b>
Саламатин Александр Васильевич, ОИЯИ, Дубна <avsalam@nusun.jinr.ru>	P-40
Саламатов Евгений Иванович, ФТИ Уро РАН, Ижевск	O-38
Саркисян Вахтанг Акопович, ИКРАН, Москва <vakhtang@ns.crys.ras.ru>	P-34
Севастьянова Людмила Григорьевна, МГУ, Москва <b.bulychev@highp.msk.ru>; Факс:(095)-939-20-57; Тел.:(095)-939-36-87	<b>P-8</b>
Серга Максим Андреевич, ИСМ НАНУ, Киев, Украина <sermax@nm.ru>; Факс: (044)4329529; Телефон: (044)463-9951	O-32
Серебряная Надежда Рувимовна, ФГУ “ТИСНУМ”, Троицк <nadia@ntestm.troitsk.ru>	O-6
Сидоров Олег Валентинович, МГТУ им. А.Н. Косыгина, Москва <sid_ov@mail.ru>; Тел.: (095)- 955-37-54	<b>P-42</b>
Сизова Елена Викторовна, Геофак МГУ, Москва	O-41
Сиколенко Вадим Витальевич, ОИЯИ, Дубна <Vadim.Sikolenko@jinr.ru>, <sikolen@nf.jinr.ru>	P-16
Симкин Валерий Гиршович, ОИЯИ, Дубна <simkin@nf.jinr.ru>	P-16
Синицын Виталий Витальевич, ИФТТ РАН, Черноголовка <sinitsyn@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	<b>P-51</b>
Синько Геннадий Васильевич, РФЯЦ – ВНИИТФ, Снежинск Челябинской обл. <g.v.sinkor@vniitf.ru>; Факс: (351-72)-5-51-18; Тел.: (351-72)-5-47-30	<b>O-33;</b>
Скородумов Владимир Федорович, МГТУ им А.Н. Косыгина, Москва <sid_ov@mail.ru>; Тел.: (095)- 955-37-54	<b>O-34</b>

Смирнов Николай Александрович, РФЯЦ – ВНИИТФ, Снежинск Челябинской обл. <n.a.smirnov@vniitf.ru>	O-33
Соменков Виктор Александрович, ФГУ РНЦ «Курчатовский институт», Москва <somenkov@issph.kiae.ru>; Факс: (095)-196-99-08; Тел.: (095)-196-71-68	O-5; <b>O-35</b> ; P-10
Сорокин Артемий Андреевич, НИИЯФ МГУ, Москва <sorokin@srddan.npi.msu.su>	P-46
Спивак Анна Валерьевна, ИЭМ РАН, Черноголовка <spivak@iem.ac.ru>	<b>O-36</b>
Спицына Наталья Германовна, ИПХФ РАН, Черноголовка <spitsina@icr.ac.ru>; Факс: (096)-515-35-88; Тел.: (096)-2522-33-93	<b>P-55</b>
Стегайлов Владимир Владимирович, ИТЭС РАН, Москва <stegailov@ihed.ras.ru>; Факс: (095)-485-79-90; Телефон: (095)-485-24-56	<b>O-37</b>
Страумал Борис Борисович, ИФТТ РАН, Черноголовка <straumal@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-59; P-60; <b>P-61</b>
Сурсаева Вера Григорьевна, ИФТТ РАН, Черноголовка <sursaeva@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-60
Суханова Ксения Юрьевна, УрГУ, Екатеринбург	P-3
Талуц Нина Иосифовна, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <NinaTaluts@imp.uran.ru>; Факс: (343)-374-52-44; Тел.: (343)-378-38-01	P-11; <b>P-12</b>
Таракина Надежда Владимировна, ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург <tarakina@ihim.uran.ru>	O-40
Татур С.В., УрГУ, Екатеринбург <Alexey.Babushkin@usu.ru>	P-37
Теплых Александр Еренеевич, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <teplykh@uraltc.ru>	O-23
Терновой Владимир Яковлевич, ИПХФ РАН, Черноголовка <ternovoi@icr.ac.ru>; Факс: (095)-785-70-29; Тел.: (095)-785-70-29	<b>P-52</b>
Тиссен Владимир Григорьевич, ИФТТ РАН, Черноголовка <tissen@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	P-56
Титова Светлана Геннадьевна, ГУ ИМЕТ УрО РАН, Екатеринбург <sgtitova@mail.ru>; Факс: (343)-267-91-86; Телефон: (343)-267-89-09	<b>P-43</b>
Тихомирова Галина Владимировна, УрГУ, Екатеринбург <Galina.Tikhomirova@usu.ru>; Факс: (343)-261-68-85; Тел.: (343)-261-74-41	P-7
Товбин Юрий Константинович, ГНЦ РФ НИФХИ им. Л.Я. Карпова, Москва <tovbin@cc.nifhi.ac.ru>; Факс: (095)-975-2450; Тел.: (095)-373-44-22	<b>P-5</b>
Топорова Надежда Владимировна, УрГУ, Екатеринбург <Nadezda_Toporova@usu.ru>	P-43
Трефилова Анна Николаевна, УрГУ, Екатеринбург <trefilova@mail.ru>	P-2

Троян Иван Александрович, ИФВД РАН, Троицк <itrojan@mail.ru>	O-16; P-34
Трубицын Виктор Юрьевич, ФТИ УрО РАН, Ижевск <tvu@otf.fti.udmurtia.su>; Факс: (3412)-25-06-14; Тел.: (3412)-21-89-88	<b>O-38; P-44; P-45</b>
Трунин Рюрик Фёдорович, РФЯЦ – ВНИИЭФ, Саров Нижегородской обл. <root@gdd.vniief.ru>; Факс: (831-30) 459-58; Тел.: (831-30) 450-09	<b>O-39</b>
Тютюнник Александр Петрович, ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург <tyutyunnik@ihim.uran.ru>; Факс: (3432) 74-44-95 Тел.: (3432) 49-34-26	<b>O-40; P-25; P-32</b>
Федотов Владимир Константинович, ИФТТ РАН, Черноголовка <fedotovmv@mtu-net.ru>; Факс: 8(252) 49-701 Тел.: (095) 993-27-55	<b>P-16; P-18</b>
Фельдман Вилен Изильевич, Геофак МГУ, Москва <feldman@geol.msu.ru>; Тел.: (095)-939-11-64	<b>O-41</b>
Филимонов Александр Сергеевич, ИПХФ РАН, Черноголовка <fil@ficp.ac.ru>	P-52
Филоненко Владимир Павлович, ИФВД РАН, Троицк <filv@ns.hppi.troitsk.ru>; Факс: (095)-334-00-12; Тел.: (095)-334-08-10	O-18; <b>O-43; P-26</b>
Философов Дмитрий Владимирович, ОИЯИ, Дубна <kochetov@nusun.jinr.ru>	P-40
Флягина Елена Сергеевна, УрГУ, Екатеринбург	P-3
Фомичева Людмила Николаевна, ИФВД РАН, Троицк <tsvyash@hppi.troitsk.ru>; Факс: (095)-334-00-12; Тел.: (095)-334-05-93	O-24; O-46; P-40; <b>P-46</b>
Фурсова Татьяна Николаевна, ИФТТ РАН, Черноголовка <fursova@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701 Тел.: (095) 993-27-55	P-49
Фортов Владимир Евгеньевич, ИТЭС РАН, Москва <fortov@ras.ru>; <fortov@ficp.ac.ru>	O-25; O-31; <b>O-44;</b> P-52
Фролова Наталья Юрьевна, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <frolova@imp.uran.ru>	O-45; P-50
Харкунов Александр Иванович, ИФТТ РАН, Черноголовка <harkunov@issp.ac.ru>	P-21; P-49
Харламова Светлана Александровна, ИФ СО РАН Красноярск <stais@iph.krasn.ru>; Факс: (3912)43-89-23; Тел.: (3912)43-29-06	<b>P-28</b>
Хвостанцев Лев Григорьевич, ИФВД РАН, Троицк <khvost@hppi.troitsk.ru>	O-15
Хейфец Алексей Эдуардович, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <kheifetz@imp.uran.ru>; Факс: (343)374-52-44; Тел.: (343)378-35-54	<b>O-45; P-50</b>
Хейфец (Хейфец-Кобелева) Ольга Леонидовна, УрГУ, Екатеринбург <olga.kobeleva@usu.ru>	P-1; P-3; P-4
Хомская Ирина Вячеславовна, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <khomskaya@imp.uran.ru>	O-17

Хорев Иван Ефимович, ТУСУР, Томск <khorev@main.tusur.ru>; Факс: (382-2)-52-63-65; Тел.: (382-2)-52-79-12	P-31
Хрущева Алена Сергеевна, ИФТТ РАН, Черноголовка <alenahas@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701 Тел.: (095) 993-27-55	<b>P-60</b> ; P-61
Царева Зоя Геннадьевна, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <Zoya@mail.ioffe.ru>	O-8
Цвященко Анатолий Васильевич, ИФВД РАН, Троицк <tsvyash@hppi.troitsk.ru>	O-24; <b>O-46</b> ; P-40; P-46
Циок Олег Болеславович, ИФВД РАН, Троицк <tsiok@hppi.troitsk.ru>	O-15
Шахов Федор Михайлович, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <fed80@hotmail.ru>	O-8; O-21
Шахрай Денис Владимирович, ИПХФ РАН, Черноголовка <kagan@icp.ac.ru>	O-31
Шебанин Анатолий Павлович, ОИГГМ СО РАН, Новосибирск <borovik@uiggm.nsc.ru>; Тел. 89139506052	<b>P-6</b>
Шевчук Сергей Николаевич, ИСМ НАНУ, Киев, Украина <aspir3@bigmir.net>; Факс: +38 044 432 95 29; Тел.: + 38 044 463 99 51	<b>P-39</b>
Шехтман Вениамин Шоломович, ИФТТ РАН, Черноголовка <shekht@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701 Тел.: (095) 993-27-55	P-20
Шилобреева Светлана Николаевна, ГЕОХИ РАН, Москва <shilobre@mail.ru>	O-36
Ширани Елена Николаевна, ИФВД РАН, Троицк <mtu-akselrod@mtu-net.ru>; Факс: (095)-334-00-12; Тел: (095)-334-05-93	<b>P-40</b>
Шкерин Сергей Николаевич, ИВТЭХ УрО РАН, Екатеринбург <Shkerin@ihte.uran.ru>	O-2; P-3
Шмулович Кирилл Ильич, ИЭМ РАН, Черноголовка <Kiril@iem.ac.ru>; Тел. (095) 437 53 19	<b>O-47</b>
Шульга Юрий Макарович, ИПХФ РАН, Черноголовка <shulga@icp.ac.ru>; Тел.: (096)-522-36-70	<b>P-41</b> ; P-49
Щенников Владимир Викторович, ИФМ УрО РАН, Екатеринбург <vladimir.v@imp.uran.ru>; Тел.: 343 3783739	O-28; <b>P-9</b>
Щенников Всеволод Владимирович, ИММ УрО РАН, Екатеринбург <vladimir.v@imp.uran.ru>	P-9
Щур Дмитрий Викторович, ИПМ НАНУ, Киев, Украина <shurzag@materials.kiev.ua>	P-41
Юсенко Кирилл Валериевич, ИНХ СО РАН, Новосибирск <yusenko@che.nsk.su>	P-32
Яговкина Мария Александровна, ФТИ РАН, Санкт-Петербург <Ymasha@mail.ioffe.ru>	O-8; O-21

Яковлев Евгений Николаевич, ИФВД РАН, Троицк <enyakovlev@mtu-net.ru>	P-4
Якушев В.В., ИПХФ РАН, Черноголовка <yakushev@icp.ac.ru>	O-31
Ярош Владимир Васильевич, ИПМ НАНУ, Киев, Украина	O-22
Яшин Вениамин Александрович, АООТ «Абразивный завод «Ильич», Санкт-Петербург	O-21
Яшников Виктор Петрович, ИФТТ РАН, Черноголовка <yashnik@issp.ac.ru>; Факс: 8(252) 49-701; Тел.: (095) 993-27-55	<b>P-48</b>
Abrikosov, Igor A., Linköping University, Sweden <Igor.Abrikosov@ifm.liu.se>; Fax: +46-13-132285; Tel.: +46-13-285650	<b>O-1</b>
Ahsbahr, Hans, Inst. of Mineralogy, Philipps-Univ. Marburg/Lahn, Germany <ahsbahr@mail.uni-marburg.de>	P-15; P-29
Avila, M.A., Ames Laboratory, USA <avila@ameslab.gov>	O-46
Boehler, Reinhard, Max Planck Inst. für Chemie, Mainz, Germany <boe@mpch-mainz.mpg.de>	O-16; P-47
Canfield, Paul, Ames Laboratory, Ames, USA <canfield@ameslab.gov>	O-46
Chudinovskikh, Liudmila, Max Planck Inst. Chem., Mainz, Germany <chud@mpch-mainz.mpg.de>; Fax: 49 6131 305 330; Tel.: 49 6131 305 314	<b>P-47</b>
Degtyareva, Olga, Geophys. Lab., Carnegie Inst. Washington, USA <o.degtyareva@gl.ciw.edu>; Fax: 1-202-478-8901; Tel.: 1-202-478-8948	<b>O-11</b>
Dmitriev, Vladimir [Дмитриев Владимир Петрович], SNBL, ESRF, Grenoble, France <dmitriev@esrf.fr>	P-30; P-51
Dubrovinsky, Leonid S., Bayerisches Geoinst., Univ. Bayreuth, Germany <Leonid.Dubrovinsky@Uni-Bayreuth.de>; Fax: +49 (0)921/55-3736 Tel.: +49 (0)921/55-3769	<b>O-14; P-13</b>
Dubrovinskaja, Natalia A., Bayerisches Geoinst., Univ. Bayreuth, Germany <Natalia.Dubrovinskaja@Uni-Bayreuth.de>; Fax: +49 (0)921/55-3739 Tel.: +49 (0)921/55-3769	O-14; <b>P-13</b>
Dzivenko, D.A., Max Planck Inst. für Chemie, Mainz, Germany <dad@mpch-mainz.mpg.de>	O-16
Eremets, Mikhail I., Max Planck Inst. für Chemie, Mainz, Germany <eremets@mpch-mainz.mpg.de>; Fax: 0049-6131-305330; Tel.: 0049-6131-305312	<b>O-16</b>
Filipek, Stanislaw M., Inst. Phys. Chem. PAS, Warsaw, Poland <smf@ichf.edu.pl>; Fax (+48) 22 632 52 76; tel. (+48) 22 632221	O-42
Fiquet, Guillaume, LMCP, Université Paris-6, France <Guillaume.Fiquet@lmcp.jussieu.fr>	O-48

Fransson, Åke, Umea University, Umea, Sweden <Ake.Fransson@tfe.umu.se>	O-6
Gregoryanz, Eugene, Geophys. Lab., Carnegie Inst. Washington, USA <e.gregoryanz@gl.ciw.edu>; Fax: 1-202-478-8901; Tel.: 1-202-478-8953	<b>O-9</b> ; O-11; O-48
Grosse, Gerhard, Technische Univ. München, Garching, Germany <gerhard_grosse@web.de>	P-16
Hansen, Thomas, ILL, Grenoble, France <hansen@ill.fr>	P-16; P-18
Haubak, Bjørn, Inst. for Energy Technology, Kjeller, Norway <bjorn.hauback@ife.no>	P-16
Häussermann, Ulrich, Dept. Inorg. Chem., Stockholm Univ., Sweden <ulrich@inorg.su.se>	P-35
Hemley, Russel J., Geophys. Lab., Carnegie Inst. Washington, USA <r.hemley@gl.ciw.edu>	O-11
Khabashesku, V.N. [Хабашеску Валерий Николаевич], Rice Univ., Huston, USA <khval@rice.edu>	P-26
Lidin, Sven, Dept. Inorg. Chem., Stockholm Univ., Stockholm, Sweden <sven@inorg.su.se>	P-35
Liu, R.S., Dept. Chem., Natl. Taiwan Univ., Taiwan, R.O.C.	O-42
Lojkowski, Witold, High Press. Res. Center PAS, Warsaw, Poland <wl@unipress.waw.pl>	P-2
López, G.A., Max-Planck-Institut für Metallforschung, Stuttgart	P-59; P-61
Mao, Ho-kwang, Geophys. Lab., Carnegie Inst. Washington, USA <mao@gl.ciw.edu>	O-11
Marchuk, I., Institute of Phys. Chem. PAS, Warsaw, Poland	O-42
Machon, Denis, SNBL ESRF, Grenoble, France <uccadma@ucl.ac.uk>	P-51
Mezouar, Mohamed, ESRF, Grenoble, France <mezouar@esrf.fr>	O-48
Mikhaylushkin, Arkady S., Dept. Inorg. Chem., Stockholm Univ.; Dept. Phys., Uppsala Univ., Sweden <arkady@fysik.uu.se>; Fax: +46 18 511784; Tel.: +46 18 471 3621	<b>P-35</b>
Morard, Guillaume, ESRF, Grenoble, France <morard@esrf.fr>	O-48
Oganov, Artem R., Dept. Matls, Swiss Federal Inst. Technol. (ETH) Zurich, Zurich, Switzerland <a.oganov@mat.ethz.ch>; Fax: +41-1-632-1133; Tel.: +41-1-632-3752	O-13; <b>O-29</b>
Ohishi, Yasuo, SPring-8, Hyogo, Japan <step@ns.crys.ras.ru>	P-43

Opalinska, Agneshka, Unipress, PAS, Warsaw, Poland <wl@unipress.waw.pl>	P-2
Palasyuk, Taras, Inst. Phys.Chem. PAS, Warsaw, Poland <daltar@ichf.edu.pl>	P-62
Paul-Boncour, V., 1- LCMTR, CNRS, Thiais, France	O-42
Petrovic, C., Brookhaven National Laboratory, Upton, USA <petrovic@ameslab.gov>	O-46
Popov, Mikhail Yu., Max Planck Inst. für Chemie, Mainz, Germany <m-popov@mpch-mainz.mpg.de>	O-16
Raitala, Jouko, University of Oulu, Oulu, Finland <jouko.raitala@oulu.fi>	O-3
Ribeiro, R.A., Ames Laboratory, Ames, USA <ribeiro@ameslab.gov>	O-46
Sanloup, Chrystèle, Lab. MAGIE, Univ Paris-6, Paris, France <sanloup@ccr.jussieu.fr>; Fax: (33)-144273911; Tel.: (33)-144275207	<b>O-48</b>
Svensson Gunnar, Stockholm Univ., Stockholm, Sweden <gunnar@struc.su.se>	O-40
Simak, Sergei I., Dept. Phys., Uppsala Univ., Uppsala, Sweden <sergeis@fysik.uu.se>	P-35
Sowa, Heidrun, Inst. of Mineralogy, Philipps-Univ. Marburg/Lahn, Germany <sowa@staff.uni-marburg.de>	P-29
Sugiura, H., Yokohama City Univ., Yokohama, Japan	O-42
Sundberg, Margareta, Arrhenius Lab., Stockholm Univ., Stockholm <marsu@inorg.su.se>	O-18
Sundqvist, Bertil, Umea University, Umea, Sweden <bertil.sundqvist@physics.umu.se>	O-6
Tkacz, Marek, Inst. Phys. Chem. PAS, Warsaw, Poland <temar@ichf.edu.pl>; Fax: 48(22) 6325276; Tel.: 48(22) 6323221 ext. 3262	P-17; <b>P-62</b>
Weber, Hans-Peter, SNBL ESRF, Grenoble, France <weber@esrf.fr>	P-29; P-30; P-51
Werner, Per-Erik, Arrhenius Lab., Stockholm Univ., Stockholm <pew@struc.su.se>	O-18
Yartys Volodymyr, Institute for Energy Technology, Kjeller, Norway <Volodymyr.Yartys@ife.no>	P-16