

СОВЕЩАНИЯ И КОНФЕРЕНЦИИ

.53(048)

**НАУЧНАЯ СЕССИЯ ОТДЕЛЕНИЯ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ И АСТРОНОМИИ
И ОТДЕЛЕНИЯ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ АКАДЕМИИ НАУК СССР
(24-25 июня 1987 г.)**

24 и 25 июня 1987 г. в Институте физических проблем им. С. И. Вавилова АН СССР состоялась совместная научная сессия Отделения общей физики и астрономии и Отделения ядерной физики АН СССР. На сессии были заслушаны доклады:

24 июня

1. В. И. С и м о н о в. Структурные исследования кристаллов с особыми физическими свойствами.
2. А. А. Ч е р н о в. Элементарные процессы роста кристаллов из раствора.
3. С. М. С т и ш о в. Проблемы физики сверхвысоких давлений

25 июня

4. Н. С. К а р д а ш е в, В. М. К о в т у н е н к о. Наземно-космический радиоинтерферометр и определение фундаментальных космологических констант.

5. Г. Б. Х р и с т и а н с е н. Перспективы исследования космических лучей предельно высоких энергий (10^{16} — 10^{21} эВ).

Краткое содержание трех докладов приводится ниже.

548 : 53(048)

В. И. Симонов. Структурные исследования кристаллов с особыми физическими свойствами. Учет все более тонких эффектов взаимодействия излучения с кристаллами и доведение теории до счетных формул дают возможность при обработке экспериментальных данных по дифракции рентгеновских лучей и нейтронов принимать во внимание эти эффекты и получать параметры соответствующих особенностей строения кристаллов. Например: ангармонизм тепловых колебаний атомов в кристаллах позволяет прогнозировать в них фазовые переходы типа смещения, экстинкционные эффекты дают характеристики размеров и разориентации блоков мозаики в монокристалле и т. д. Многоволновая дифракция ведет к методам экспериментального определения фаз структурных амплитуд. В настоящее время разрабатывается аппаратура для превращения этого подхода в рабочий инструмент исследователя. Создание управляемых ЭВМ автоматических дифрактометров впервые открыло возможность оптимизации измерения каждого дифракционного отражения с обратной связью по ряду параметров.

Все это вместе взятое позволяет ставить и успешно решать проблему структура — свойства кристаллических материалов. Необычайно широк диапазон объектов исследования структурной кристаллографии: от металлов и

сплавов до белков и вирусов. И в каждом случае дифракционные методы исследования дают уникальную информацию о строении соответствующих объектов, которая недоступна другим методам.

Весьма сильные результаты получены при структурных исследованиях монокристаллов твердых электролитов. Эти материалы с высокой ионной проводимостью — суперионные проводники — привлекают внимание исследователей своеобразием фазовых переходов и весьма важными практическими

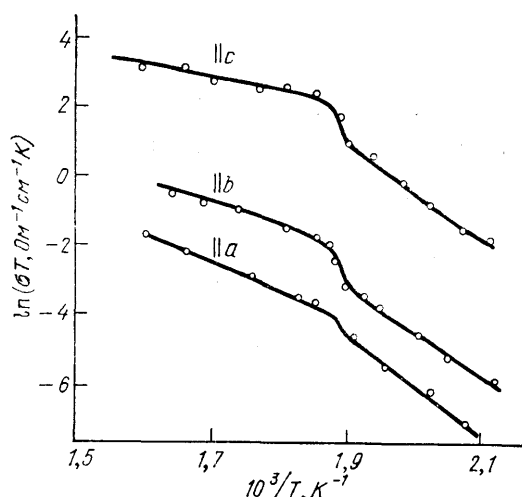


Рис. 1. Температурная зависимость проводимости по ионам Li в монокристаллах $\text{Li}_3\text{Se}_2(\text{PO}_4)_3$ вдоль кристаллографических направлений a , b , c

применениями (источники и аккумуляторы энергии нового типа, малогабаритные конденсаторы гигантской емкости и т. д.). На рис. 1 воспроизведена температурная зависимость проводимости по ионам Li в трех взаимно перпендикулярных направлениях в монокристалле $\text{Li}_3\text{Se}_2(\text{PO}_4)_3$. Изменение температуры в пределах 200° ведет к различию в проводимости на 5 порядков. При фиксированных температурах анизотропия проводимости достигает в этих монокристаллах 2 порядков. Рентгеноструктурные исследования при разных температурах позволили установить атомный механизм фазового перехода в суперионное состояние, пути легкого транспорта в монокристалле ионов Li, причины анизотропии проводимости. В зависимости от ре-

жима нагревания и охлаждения образца в низкотемпературной фазе наблюдается микродвойникование кристалла с различным отношением объемов компонент двойника и соответствующим влиянием этого эффекта на макросвойства. При нейтронографических исследованиях монокристаллов RbNbWO_6 и TiNbWO_6 , обладающих фазовым переходом типа сегнетоэлектрик — суперионный проводник, установлены структурные причины более высокой (на 2 порядка) проводимости в суперионных фазах по ионам Ti по сравнению с ионами Rb. Анализ ангармонизма тепловых колебаний атомов в высокотемпературной фазе позволил понять характер перестройки структур при фазовом переходе.

Нейтроноструктурные исследования кристаллов нестехиометрических фторидов, выполненные нашим коллективом, вносят существенные исправления в господствующие в литературе структурные модели этих важных для практических применений твердых растворов. Нестехиометрические фториды это и лазерные материалы, суперионные по анионам проводники, датчики газового загрязнения среды, материалы оптических систем. Для нестехиометрических фторидов флюоритового типа по нейтронографическим дифракционным данным доказано существование двух типов структур. Установлены закономерности образования этих структур и кластерный их характер. Области существования каждого из этих типов структур и строение кластеров в них определяются отношением размеров двухвалентных катионов исходной структуры и трехвалентного катиона примеси. Программируемое изменение химического состава и строения нестехиометрических фторидов флюоритового типа позволяют непрерывным образом регулировать физические свойства соответствующих соединений. Например, в кристаллах BaF_2 и $\text{Ba}_{0.69}\text{La}_{0.31}\text{F}_{2.31}$ твердость по грани (111) составляет 80 и 250 кг мм^{-2} , а ионная проводимость по анионам F возрастает с добавлением лантана на 6 порядков. И мы можем указать состав и вырастить монокристалл с требуемым

параметром по данному свойству, разумеется, в указанных выше пределах. Различаются у этих соединений и, следовательно, поддаются целенаправленной регулировке температуры плавления, показатели преломления, поглощение инфракрасного излучения и т. д.

Структурная кристаллография дифракционными методами решает проблему структура — свойства относительно самых различных свойств. Показано, что уникальные акустооптические характеристики монокристаллов парателлурида $\alpha\text{-TeO}_2$ связаны с ангармонизмом тепловых колебаний атомов Тl и резкой анизотропией этих колебаний. Важнейшей характеристикой

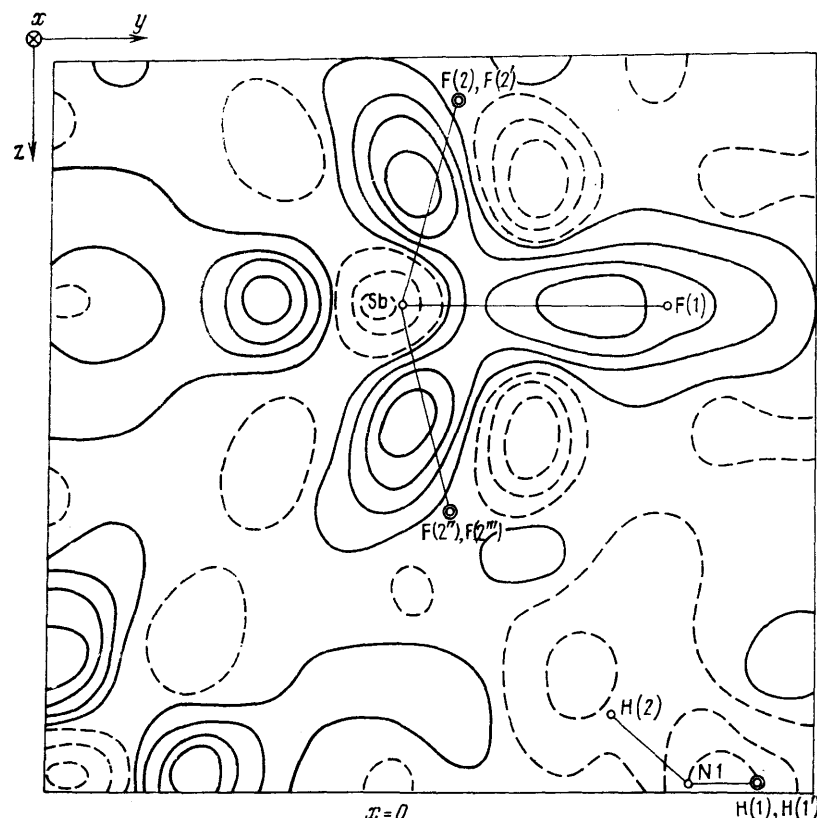


Рис. 2. Сечение деформационной электронной плотности в кристаллах $(\text{NH}_4)_2\text{SbF}_5$

для многих современных материалов является их радиационная прочность. Так, монокристаллы CsNO_3 , выращенные спонтанной кристаллизацией, выдерживают на 2 порядка большую дозу γ -излучения по сравнению с такими же кристаллами, но выращенными на затравку. Дифракционные исследования показали существенное различие в параметрах экстинкции у соответствующих образцов. А эти параметры в свою очередь определяются размерами и разориентацией блоков мозаики монокристаллов. У радиационно более стойких образцов линейные размеры блоков мозаики в пять раз меньше.

Прецизионные структурные исследования позволяют по рентгеновским дифракционным данным устанавливать пространственное распределение в кристаллах внешних электронов атомов, вовлеченных в химические связи. На рис. 2 воспроизведено сечение деформационной электронной плотности для соединения $(\text{NH}_4)_2\text{SbF}_5$. Деформационная плотность — разность между распределением электронной плотности в кристалле и электронной плотностью свободных невзаимодействующих атомов, составляющих данный кристалл. Рис. 2 наглядно демонстрирует характер химических связей $\text{Sb}-\text{F}(1)$ и $\text{Sb}-\text{F}(2)$. В транс-положении к атому $\text{F}(1)$ вблизи атома Sb четко локали-

зован максимум плотности, который отвечает неподделенной электронной паре атома Sb.

Методами структурной кристаллографии успешно исследуются полупроводники, сегнетоэлектрики, нелинейные оптические материалы, лазерные и многие другие кристаллы с особыми физическими свойствами. Следующий шаг в развитии дифракционных методов связан с широким использованием синхротронного излучения и координатных детекторов. В совокупности это позволит перейти к исследованию динамики перестройки кристаллических структур. Синхротронное излучение это не только выигрыш в интенсивности, но и сплошной спектр, который открывает качественно новые возможности использования эффекта аномального рассеяния.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кристаллография и кристаллохимия.— М.: Наука, 1986.— С. 104, 215.
2. Ковьев Э. К., Симонов В. И.//Письма ЖЭТФ. 1986. Т. 43, С. 244.
3. Зварыкина А. В., Кононович П. А., Лаухин В. Н., Молчанов В. Н., Песоцкий С. И., Симонов В. И., Шibaева Р. П.//Ibidem. С. 257.
4. Молчанов В. Н., Шibaева Р. П., Качинский В. Н., Ягубский Э. Б., Симонов В. И., Вайнштейн Б. К.//ДАН СССР. 1986. Т. 286. С. 637.
5. Макарова И. П., Мурадян Л. А., Заводник В. Е, Симонов В. И.// 1985, Т. 283. С. 126.
6. Мурадян Л. А., Сирота М. И., Макарова И. П., Симонов В. И.// Кристаллография. 1985. Т. 30. С. 258.
7. Makarova I. P., Misyul S. V., Muradyan L. A., Bovina A. F., Simonov V. I., Aleksandrov K. S.//Phys. Stat. Sol. Ser. b. 1984. V. 121. P. 481.
8. Генкина Е. А., Демьянец Л. Н., Иванов-Шипц А. К., Максимов Б. А., Мельников О. К., Симонов В. И.//Письма ЖЭТФ. 1983. Т. 38. С. 257.
9. Andrianova M. E., Kheiker D. M., Popov A. N., Simonov V. I., Anisimov Yu. S., Chernenko S. P., Ivanov A. B., Movchan S. A., Reshekhonov V. D., Zanevsky Yu. V.//J. Appl. Cryst. 1982. V. 15, P. 626.