

ГЕРМАНАТ СВИНЦА. ВЫЧИСЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЯЧЕЙКИ

Многие вещества сравнительно легко получить в виде порошка, состоящего из множества беспорядочно ориентированных кристаллов. Если размеры зерен достаточно малы, то дифракционные картины от таких веществ представляют собой набор линий и называются порошковыми рентгенограммами. В общем случае порошковая рентгенограмма состоит из большого числа таких линий, фиксируя положение которых мы определяем один параметр – брегговский угол θ . На практике измеряя расстояние между сопряженными линиями порошковой рентгенограммы и по этим расстояниям для каждой линии определяем экспериментальные значения $\sin^2\theta$ [1].

Если известны параметры элементарной ячейки вещества, то индцирование линий проводится прямым методом. Кристаллы германата свинца в сегнетоэлектрической фазе характеризуются тригональной пространственной группой $R\bar{3}$ с гексагональной решеткой.

Рентгенограмма порошка германата свинца получена на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3.0. Интерпретация порошковых рентгенограмм по известной ячейке проводилась в три этапа: сначала по рентгенограмме находились брегговские углы, потом вычислялись брегговские углы для всех возможных комбинаций индексов hkl , затем проводилось сопоставление этих двух наборов.

Непосредственное вычисление углов θ было заменено вычислением значений $\sin^2\theta$, т. к. $\sin^2\theta_{hkl}$ связаны с индексами h, k, l наиболее простой зависимостью. Для кристаллов с гексагональной решеткой квадратичная форма имеет вид

$$\sin^2\theta_{hkl} = \frac{\lambda^2}{3a^2}(h^2 + hk + k^2) + \frac{\lambda^2}{4c^2}l^2$$

где a и c – ребра элементарной ячейки.

Используя отражения $hk0$, взяв плоскость 100, получаем

$$\sin^2\theta_{100} = \frac{\lambda^2}{3a^2}l^2; \text{ получаем } a = \sqrt{\frac{\lambda^2}{3\sin^2\theta_{100}}} = \sqrt{\frac{1.5418^2}{3\sin^2 5.0}} = 10.21 \text{ \AA}$$

Для отражений $00l$, для плоскости 003 получаем:

$$\sin^2\theta_{003} = \frac{\lambda^2}{4c^2}l^2, c = \sqrt{\frac{9\lambda^2}{4\sin^2\theta_{003}}} = \sqrt{\frac{9 \cdot 1.5418^2}{4\sin^2 12.51}} = 10.68 \text{ \AA}$$

Полученные данные хорошо согласуются с литературными данными [2].

Литература

1. Липсон Г., Стипл Г. Интерпретация порошковых рентгенограмм.- М.: «Мир», 1972.
2. Буш А. А., Веневцев Ю.Н. Монокристаллы с сегнетоэлектрическими и родственными свойствами в системе $Pb-GeO_2$ и возможные области их применения.- М.: НИИТЭХИМ, 1981.

РАСЧЕТ ШТАРКОВСКОЙ СТРУКТУРЫ МУЛЬТИПЛЕТОВ ИОНА Am^{3+} В ЭЛЬПАСОЛИТАХ

В работе исследуется влияние возбужденных конфигураций актиноидов на шарковское расщепление мультиплетов. а также выполнено описание шарковской структуры на приме-

ре иона Am^{3+} в эльпасолитах в приближении слабого, промежуточного и сильного конфигурационного взаимодействия.

В приближении слабого конфигурационного взаимодействия гамильтониан кристаллического поля записывается в виде ряда [1]:

$$H_{cf} = \sum_k \sum_{q=-k}^k B_q^k C_q^k \quad (1)$$

Гамильтониан кристаллического поля в приближении промежуточного по силе конфигурационного взаимодействия [1]:

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \underbrace{B_q^k + (E_{\eta_j} + E_{\gamma_j} - 2E_j^0) G_q^k}_{\bar{B}_q^k} C_q^k, \quad (2)$$

В приближении сильного конфигурационного взаимодействия получен следующий гамильтониан кристаллического поля [1]

$$H_{cf} = \sum_{k,q} \underbrace{B_q^k + \left(\frac{\Delta^2}{\Delta - E_j} + \frac{\Delta^2}{\Delta - E_{j'}} \right) \tilde{G}_q^k}_{\bar{B}_q^k} C_q^k, \quad (3)$$

Для Am^{3+} было выполнено описание шарковской структуры во всех трех приближениях, определены параметры кристаллического поля и параметры межконфигурационного взаимодействия. Полученные результаты подтвердили важную роль возбужденных конфигураций в формировании шарковского расщепления мультиплетов.

Литература

1. А.А. Корниенко, А.А. Каминский, Е.Б. Дунина. Влияние межконфигурационного взаимодействия на кристаллическое поле Ln^{3+} -ионов // ЖЭТФ. 166, 6(12), 2078-2102 (1999)

УДК 620.10 (07)

Студ. Дубинин А.В.,
доц. Калинин А.А.

УТОЧНЕНИЕ ФОРМУЛЫ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ ГИБКОГО БРУСА С РАВНОМЕРНО РАСПРЕДЕЛЁННОЙ МАССОЙ

При исследовании колебаний стержневых систем кинетическая энергия гибкого бруса находится при учёте лишь движения центров тяжести его сечений, то есть без учёта вращательного движения сечений. Для оценки вносимой таким образом погрешности получена формула кинетической энергии вращательного движения сечений.

Соотношение кинетических энергий вращательного и поступательного движения сечений зависит от длины бруса и радиуса инерции сечения.

В качестве примера рассмотрена консоль прямоугольного сечения.

При длине бруса в 10 раз большей высоты его сечения кинетическая энергия вращательного движения сечений составляет менее половины процента от энергии поступательного движения.