

Саидов Ч.С., д-р физ-мат. наук, проф.;
Халияров Ж.Х., преп.; Муминов Б.С., преп.
(ТерГУ, г. Термез, Узбекистан)

РАСЧЕТ ТЕНЗОРА КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ГЭП ДЛЯ УЗЛОВ РЕШЕТОК $YBa_2Cu_3O_{7-x}$

Тензоры кристаллического ГЭП (градиент электрического поля) в катионных и анионных узлах решеток $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ рассчитывались в приближении модели точечных зарядов. Решетка $YBa_2Cu_3O_7$ записывалась в виде $YBa_2Cu(1)Cu(2)_2O(1)_2O(2)_2O(3)_2O(4)$ а решетка $YBa_2Cu_3O_6$ в виде $YBa_2Cu(1)Cu(2)_2O(1)_2O(2)_2O(3)_2$.

Компоненты тензоров для n -узла записывались в виде

$$V_{gpkn} = \sum_i e_k^* U_{gpkn}$$

$$V_{gpkn} = \sum_i \frac{(3(g_{ikn}^2 / r_{ikn}^2) - 1)}{r_{ikn}^5} \quad (1)$$

$$V_{gpkn} = \sum_i \frac{3g_{ikn} p_{ikp}}{r_{ikp}^5}$$

где k – индекс суммирования по подрешеткам ($k=1-y, k=2-Ba, k=3-Cu(1), k=4-Cu(2), k=5-O(1), k=6-O(2), k=7-O(3), k=8-O(4)$) e_k^* – эффективный заряд ионов, k – подрешетки, i – индекс суммирования по узлам внутри подрешетки, r_{ikn} – расстояние от i -узла k – подрешетки до узла n – подрешетки, gp – декартовы координаты.

Для расчета компонент тензора ГЭП решетки $YBa_2Cu_3O_6$ структурные параметры были взяты из работы [1], а для расчета тензора ГЭП решетки $YBa_2Cu_3O_7$ – из работы [1]. Часть расчетов была сделана с использованием структурных данных авторов [2]. Для каждого конкретного случая мы указываем источник структурных данных. Отметим лишь, что результаты расчетов с использованием различных структурных данных весьма близки.

Решеточные суммы U_{gg} и U_{gp} рассчитывались на ЭВМ, суммирование проводилась внутри сферы радиуса 30 \AA . Тензоры решеточных сумм от всех подрешеток оказались диагональными в кристаллографических осях. Главная компонента тензора кристаллического ГЭП $V_{zzcr} = eq_{cr}$ определялась после подстановки в (1) значений e_k^* . Параметр асимметрии тензора ГЭП n_{cr} рассчитывался по соотношению

$$n_{cr} = \frac{V_{xxcr} - V_{yycr}}{V_{zzcr}}$$

причем главные оси тензора кристаллического ГЭП $\{x, y, z\}$ выбирались исходя из неравенства $|V_{zzcr}| > |V_{yycr}| > |V_{xxcr}|$

В табл.1 приведены результаты расчетов тензора кристаллического ГЭП в узлах $Cu(1)$ и $Cu(2)$ для наиболее часто используемых моделей распределения зарядов по узлам решеток $YBa_2Cu_3O_{7-x}$.

Таблица 1 - Параметры тензора кристаллического ГЭП для узлов меди решеток $YBa_2Cu_3O_x$

Модель распределения зарядов	eq_{cr3} , $\frac{e}{A}$	n_{cr3}	eq_{cr4} , $\frac{e}{A}$	n_{cr4}
$Y^{3+}Ba_2^{2+}Cu(1)^+Cu(2)_2^{3+}O_7^{2-}$	0,997	0,02	0,552	0,16
$Y^{3+}Ba_2^{2+}Cu(1)^{2+}Cu(2)_2^{2+}O_7^{2-}$	1,162	0,40	0,700	0,13
$Y^{3+}Ba_2^{2+}Cu(1)^+Cu(2)_2^{2+}O_6^{2-}$	-1,252	0,00	0,669	0,00
$Y^{3+}Ba_2^{2+}Cu(1)^{3+}Cu(2)_2^{2+}O_6^{2-}$	-1,569	0,00	0,816	0,00

ЛИТЕРАТУРА

1. Тураев Э.Ю., Тураев Н.Ю., Серегин П.П. // Электронная структура меди в $YBaCuO$, определенная методом эмиссионной Мессбауэровской спектроскопии. Узбекский физический журнал. 1991. Вып.3. С. 42-46.

2. Marezio J.J., Chaillout C.E. // Structure of the 100 K superconductor $YBaCuO$ between 5-300 K. Europhys. Lett. 1987. V.3. P. 1301-1307.

УДК 54-145+541.64:546.6

А.С. Косимов, проф., кан. хим.наук
(ТерГУ г.Термез, Узбекистан);

А.А. Холмуминов, проф., д. физ.-мат. наук
(Национальный Университет Узбекистана, г. Ташкент)

ОПТИЧЕСКИЕ АНИЗОТРОПИИ ПЛЕНОК Na-КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ РАЗЛИЧНОЙ СТЕПЕНИ РАСТВОРЕНИЯ

Пленки полимеров, в частности, Na-карбоксиметилцеллюлозы (Na-КМЦ) могут быть получены путем испарения растворителя из тонкого слоя раствора данного полисахарида. При этом очень важно контролировать фазовую однородность раствора, поскольку, в зависимости от степени замещения образцы Na-КМЦ растворяются в раз-