

рым осуществляются прыжки носителей заряда, становится равной половине ширины кулоновской щели. Если используется этот критерий определения температуры перехода T_c , то безразмерный параметр $\alpha = 2,7$. Для экспериментально определенных нами параметров $T_0^{SE} = 1210$ К и $T_0^M = 134345$ К для сеточных структур формула (2) дает значение $\alpha = 9,25$, а для тонких пленок ($T_0^{SE} = 289,6$ К и $T_0^M = 12276$ К) $\alpha = 5,5$, что является вполне резонным.

Таким образом, на основе анализа температурных зависимостей сопротивления нами был сделан вывод, что механизмом проводимости в углеродных сетчатых структурах и углеродных пленках, полученных при $T_{отж} = 950^\circ\text{C}$, является прыжковая проводимость по локализованным состояниям при наличии кулоновской щели в энергетическом спектре плотности состояний.

Литература

1. Башмаков И. А., Григорьева И. М., Соловьева Л. В., Капуцкий Ф. Н., Самуйлов В. А., Бутылина И. Б., Ксенович В. К. Получение структурированных низко-размерных углеродных, карбидных и металлических материалов// Неорганические материалы. 2000. Т.36, №2. с. 1–5.
2. Забродский А. Г. Прыжковая проводимость и ход плотности локализованных состояний в окрестности уровня Ферми// ФТП. 1977. Т.11, №3. с. 595–598.
3. Шкловский Б. И., Эфрос А. Л. Электронные свойства легированных полупроводников. Москва: Наука, 1979, с. 416.
4. Rosenbaum R. Crossover from Mott to Efros-Shklovskii variable-range-hopping conductivity in In_xO_y films / Phys. Rev. B. 1991. Vol.44, №8. P. 3599-3603.

РАСЧЕТ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ БЕРИЛЛИДА НИОБИЯ Ni_3V_6 СО СТРУКТУРОЙ A15

О. Г. Ермак

Соединения со структурой A15 относятся к сверхпроводниковым материалам. Многие соединения, обладающие этой структурой, имеют температуры перехода в сверхпроводящее состояние $T_c > 15$ К: Nb_3Sn (18 К), Nb_3Al (18,8 К), Nb_3Ga (20,3 К), Nb_3Si (19 К), Ta_3Au (16,0 К), а также Ni_3Ge с температурой перехода в сверхпроводящее состояние $T_c = 23.2$ К.

В соединениях со структурой A15, имеющих химическую формулу A_3B , в качестве атома А выступают обязательно переходные элементы групп IV, V и VI (Ti, V, Cr, Zr, Nb, Mb, Mo, Ta, W), тогда как атомом В могут быть как переходные (Co, Ni, Ru, Rh, Pd, Re, Os, Ir, Pt, Au), так и непереходные элементы (Al, Si, P, Ga, Ge, As, In, Sn, Sb, Pb, Bi).

В настоящее время физические свойства соединений со структурой A15 изучены достаточно подробно. Однако, несмотря на открытие высокотемпературной сверхпроводимости и смещение исследовательского интереса к сверхпроводниковым структурам с другой кристаллической структурой, синтез и исследование новых соединений класса A15 продолжают.

Недавно в работе [1] синтезирован новый бериллид ниобия Nb_3Ve , также имеющий кристаллическую структуру типа A15 и температуру перехода в сверхпроводящее состояние $T_c=10.0$ К. Электронная структура этого соединения еще не была рассчитана. Поэтому в данной работе выполнен расчет зонного спектра и плотности электронных состояний бериллида ниобия Nb_3Ve , а также проведен их анализ в сравнении с другими соединениями, имеющими подобную структуру.

В настоящей работе электронная структура бериллида ниобия Nb_3Ve рассчитывалась квазирелятивистским линейным методом присоединенных плоских волн (ЛППВ). Расчет проводился на 56 k -векторах в неприводимой части зоны Бриллюэна. Для расчета обменно-корреляционного потенциала использовалось приближение GGA (Generalized Gradient Approximation) [2]. Расчет проводился с использованием так называемого «полного потенциала», т.е. МТ-приближение не использовалось, что важно для неплотно упакованных структур. Основные состояния пересчитывались на каждой итерации, т.е. приближение «замороженного остова» не использовалось. Плотность состояний вычислялась методом тетраэдров. Процесс самосогласования считался законченным, когда изменение полной энергии не превышало 0,001 Ry.

Были рассчитаны зонный спектр, полная и парциальных плотности состояний, а также электронная плотность в плоскости (001). Результаты расчета полной и парциальных плотностей состояний приведены на Рис. 1–3.

Из Рис. 1 – 3 видно, что валентная зона имеет сложную структуру, что связано с гибридизацией различных состояний атомов-компонентов в довольно широком энергетическом диапазоне. Низкоэнергетический участок валентной зоны до энергии $\sim 0,4$ Ридб. образован преимущественно s -электронами бериллия. Тем не менее, эта часть валентной зоны не отделена от других состояний запрещенной зоной, в отличие, например, от соединений V_3X ($X=Ga, Ge, As, Si, Al$) [3]. Отметим, также, что определенный вклад в формирование этой части спектра вносят и s, p, d -состояния ниобия. Высокоэнергетический участок валентной зоны сформирован в результате гибридизации p -состояний бериллия с d -состояниями ниобия, на который накладываются зоны, образованные из s -, p -, состояний ниобия. При этом $4d$ -зона ниобия разделена щелью на две подзоны.

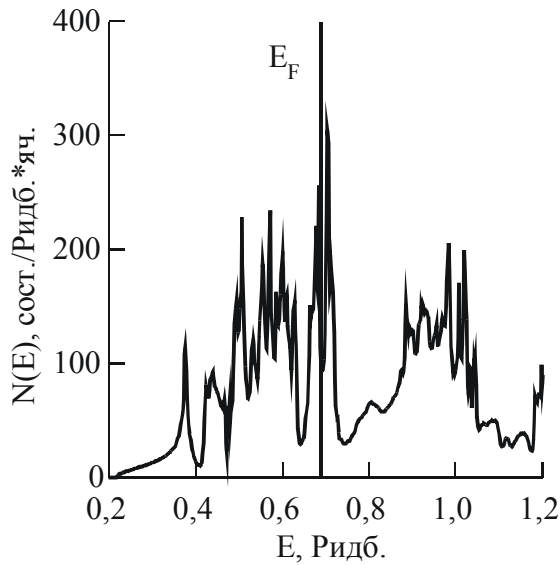


Рис. 1. Полная плотность d -состояний бериллида Nb_3Be_2 .
Вертикальной линией показан уровень Ферми

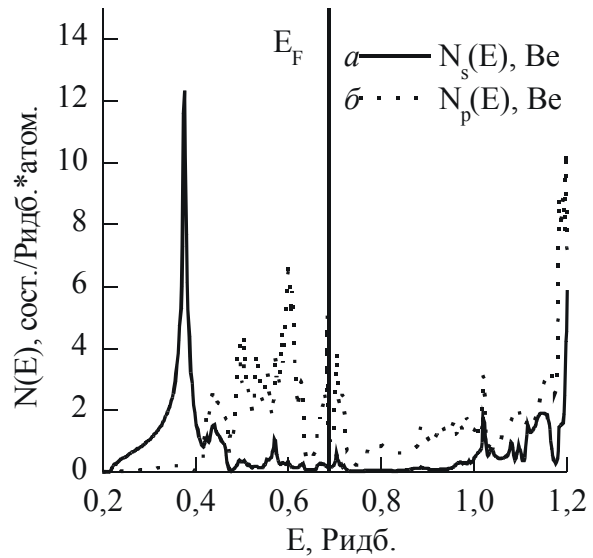


Рис. 2. Парциальные плотности состояний бериллида

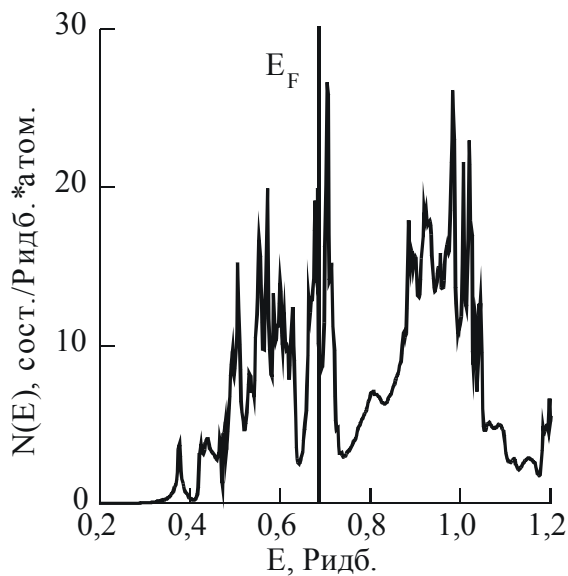


Рис. 3. Парциальная плотность d -состояний бериллида Nb_3Be_2 .
Вертикальной линией показан уровень Ферми

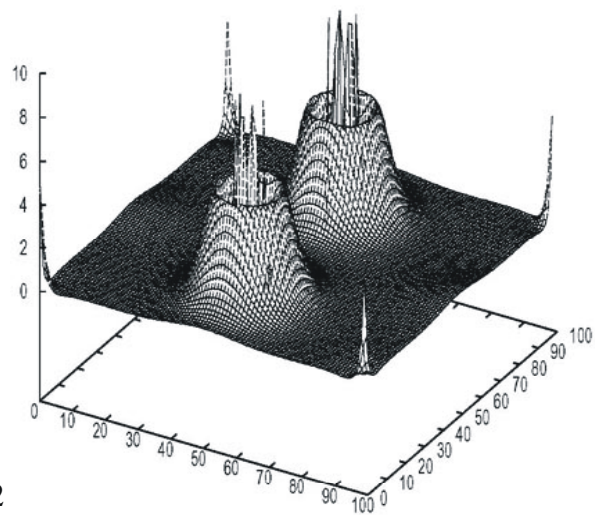


Рис. 4. Электронная плотность Nb_3Be_2 в плоскости (001)

Вблизи энергии Ферми имеют плоские зоны в окрестности состояния Γ_{12} , которые ответственны за интенсивный максимум в плотности состояний, расположенный в непосредственной близости от уровня Ферми. В отличие от других соединений типа A15, экстремально плоские зоны состоят не только из орбиталей с симметрией $d_{3z^2-r^2}$, но и из орбиталей с симметрией d_{xy} и, в особенности, с симметрией $d_{x^2-y^2}$, а малая диспер-

сия этих зон вызвана сильной межцепочечной гибридизацией d - и p -орбиталей.

Согласно расчетам ширина валентной зоны бериллида ниобия Nb_3Be равна 0.687 Ридб. Плотность состояний на уровне Ферми составляет 109.04 сост./((Ридб.*яч.) и определяется прежде всего $4d$ -состояниями ниобия.

Отметим, что энергия Ферми находится в очень узком минимуме между пиками, однако плотность состояний имеет здесь достаточно большое значение, что, возможно, указывает на некоторую нестехиометрию состава и недостаточную стабильность идеальной структуры $A15$.

Из распределения электронной плотности в Nb_3Be (Рис. 4) следует, что оно имеет вид, типичный для кристаллов с металлическим типом связи. Такая связь реализуется прежде всего между атомами ниобия. Связь между атомами бериллия относительно слаба.

В целом можно сделать вывод, что рассчитанная электронная структура имеет сходное строение с большинством соединений этого типа.

Литература

1. Тулеушев А. Ж., Володин В. Н., Тулеушев Ю. Ж. Новый сверхпроводящий бериллид ниобия Nb_3Be со структурой $A15$ // Письма в ЖЭТФ. 2003. т. 78, вып. 7. С. 908–910.
2. Mattheis L. F., Weber W. L. F. Electronic structure of cubic V_3Si and Nb_3Sn // Phys.Rev. B. Solid Sate. 1982. v. 25. №4. P.2248–2269.
3. Perdew J. P. Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Aproximation Made Simple //Phys Rev. Lett. 1996. v. 77. №18. P. 3865–3866.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ИК-ФУРЬЕ-СПЕКТРОСКОПИИ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СВЯЗУЮЩИХ ЖИВОПИСИ

Е. В. Клячковская

Живописное произведение представляет собой сложную систему, содержащую большое количество весьма разнородных слоев (рис. 1).

Специально обработанный материал с соответствующим образом подготовленной поверхностью, на которой художник создает свое произведение, называется живописным основанием. Оно состоит из собственно живописного основания (деревянные доски, холст, бумага, картон и т.д.) и грунта. Важнейшим элементом картины является живописный слой. Цветовым началом или материалом, несущим цвет краски, является пигмент – тонкостертый цветной порошок минерального или органического происхождения. Связующие живописи – природные органические соединения, на которых художник замешивает свои краски – масла, клеи,