

сия этих зон вызвана сильной междоочечной 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 State. 1982. v. 25. №4. P.2248–2269.
3. Perdew J. P. Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation 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 – тонкодисперсный цветной порошок минерального или органического происхождения. Связующие живописи – природные органические соединения, на которых художник замешивает свои краски – масла, клеи,

воск, смолы. Живопись классифицируется по связующим красок на масляную, темперу, энкаустiku, клеевую. Для защиты живописного слоя от неблагоприятного воздействия внешней среды законченное произведение покрывают защитным слоем – лаком.

В последние годы для исследования произведений искусства все шире применяются физические методы. С их помощью определяются живописные материалы – пигменты и связующие. Знание этих материалов помогает ответить на многие вопросы, связанные как с технологией создания, так и со временем написания и определением автора того или иного произведения.

В настоящее время для анализа пигментов живописи в Беларуси используется традиционный капельный микрохимический метод. Определение связующих живописи является более сложной задачей, так как они представляют собой сложную многокомпонентную систему, относящуюся к разным классам органических соединений – белкам, углеводам и липидам. К белковым относятся желатина (животные клеи), казеин молока, белок и белковая часть куриного яйца, клейковина пшеничной муки; углеводные – крахмал и камеди, а липидные – высыхающие растительные масла.

Используемые методы идентификации класса связующих (капельный микрохимический, тонкослойной хроматографии) не всегда дают однозначные результаты, трудоемки, связаны с большими временными затратами. Возможности методов часто ограничены размером пробы живописи.

Целью данной работы является применение метода ИК-Фурье спектроскопии для исследования связующих живописи.

Для изучения связующего предложенным методом использовались следующие образцы:

- Модельные образцы связующих: льняное масла, клей, темпера, смолы (мастикс, даммара, сандарак);
- Образцы, отобранные с картины «Мадонна с младенцем», взятой в Музее истории Беларуси:
 - проба1 – зеленый цвет на платье мадонны

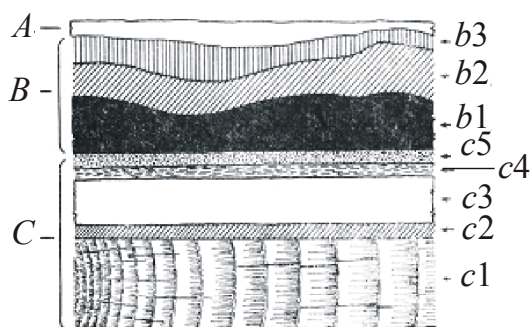


Рис. 1 Элементы картины *A* – лаковый слой; *B* – живописные красочные слои *b1* – подмалевок, *b2* – прописки, *b3* – лессировки; *C* – основание: *c1* – собственно живописное основание, *c2* – связывающий промежуточный слой, *c3* – грунтовые покрытия, *c4* – изоляционный слой, *c5* – имприматура

- проба2 – красный цвет на платье мадонны;
- проба3 – синий цвет на плате мадонны;
- проба4 – телесный цвет, отобранный с руки младенца.

Для исследования модельных систем связующих готовились пленки. Тонкий слой льняного масла, осетрового клея, яичной темперы наносился на предметное стекло, высушивался при комнатной температуре, затем отделялся от него (толщина пленки около 20 мкм) и использовался для регистрации спектров.

Для анализа микропроб живописи готовили таблетки с KBr. В отдельных случаях для отбора пробы с картины использовался специальный зонд, рабочей поверхностью которого является шероховатая кремний-карбидная бумага, линейные размеры зерен которой не превышают одного микрометра. Если осторожно потереть этим приспособлением по образцу (в нашем случае поверхность картины), то частицы краски вместе со связующим заполнят поры бумаги. Нужно проследить за тем, чтобы все поры были заполнены равномерно. Затем эта кремний-карбидная бумага, поры которой заполнены частицами краски, помещается в кювету для образцов ИК-ФУРЬЕ-спектрометра NEXUS и используется для получения ИК-спектров диффузного отражения в диапазоне $400\text{--}4000\text{ см}^{-1}$. Чтобы устранить эффекты, вызываемые работой прибора и влиянием окружающей среды, спектры образцов нормировались на спектр фона, который регистрировался, когда в кюветном отделении находилось зеркало.

ИК-спектры белков, углеводов и липидов сильно различаются. Для ИК-спектров белков характерно наличие двух основных полос поглощения – амида I (1650 см^{-1}) и амида II (1550 см^{-1}), обусловленных валентными колебаниями C=O-связи (амид I) и плоскостными деформационными колебаниями NH-связи (амид II). Белки содержится в яичном белке или желтке, казеине и желатине. Дополнительным свидетельством присутствия желатины может служить наличие полосы поглощения при 3330 см^{-1} (амид A), характерной для коллагена или желатины.

К липидным связующим относятся масла и воски; кроме того, липиды составляют почти 40 % всех веществ яичного желтка, что надо всегда иметь в виду при анализе белковых связующих. В ИК-спектре липидных связующих присутствуют интенсивные полосы валентных колебаний СН-групп при $2800\text{--}3000\text{ см}^{-1}$, полоса при $1715\text{--}1735\text{ см}^{-1}$ (валентные колебания C=O-групп), интенсивная полоса при 1170 см^{-1} , обусловлена валентными колебаниями C=O-групп простых эфиров, или интенсивная полоса при 1165 см^{-1} с двумя более слабыми полосами при 1250 и 1110 см^{-1} .

В ИК-спектрах смол присутствует широкая, интенсивная полоса валентных колебаний ОН-групп при $\sim 3500\text{ см}^{-1}$, дублет при ~ 2850 и $\sim 2950\text{ см}^{-1}$ (С–Н-валентные колебания), широкое плечо в области $2500\text{--}2700\text{ см}^{-1}$ (валентные колебания ОН-групп карбоксилных кислот), полосы в области $\sim 1700\text{ см}^{-1}$ (валентные колебания С=О-групп карбоксиллов), полосы при 1450 см^{-1} (валентные колебания CH_2 -групп), при 1380 см^{-1} (деформационные колебания CH_3 -групп), при $\sim 1250\text{ см}^{-1}$ (деформационные колебания ОН-групп кислот). Если в пробе присутствуют смоляные кислоты, то в ИК-спектре имеется широкая полоса с несколькими максимумами в области $1000\text{--}1200\text{ см}^{-1}$, а в спектрах даммары и мастикса – характерная полоса средней интенсивности при 760 см^{-1} (рис. 2.).

Проведя сравнительный анализ характеристических линий в ИК-спектрах диффузного отражения образцов, отобранных с картины, и характеристических линий ИК-спектров пропускания эталонных образцов различных связующих, пришли к выводу, что в спектрах образцов живописи присутствуют полосы, характерные для льняного масла и животного клея. Эти результаты совпадают с теми, что мы получили с помощью традиционного капельного микрохимического анализа.

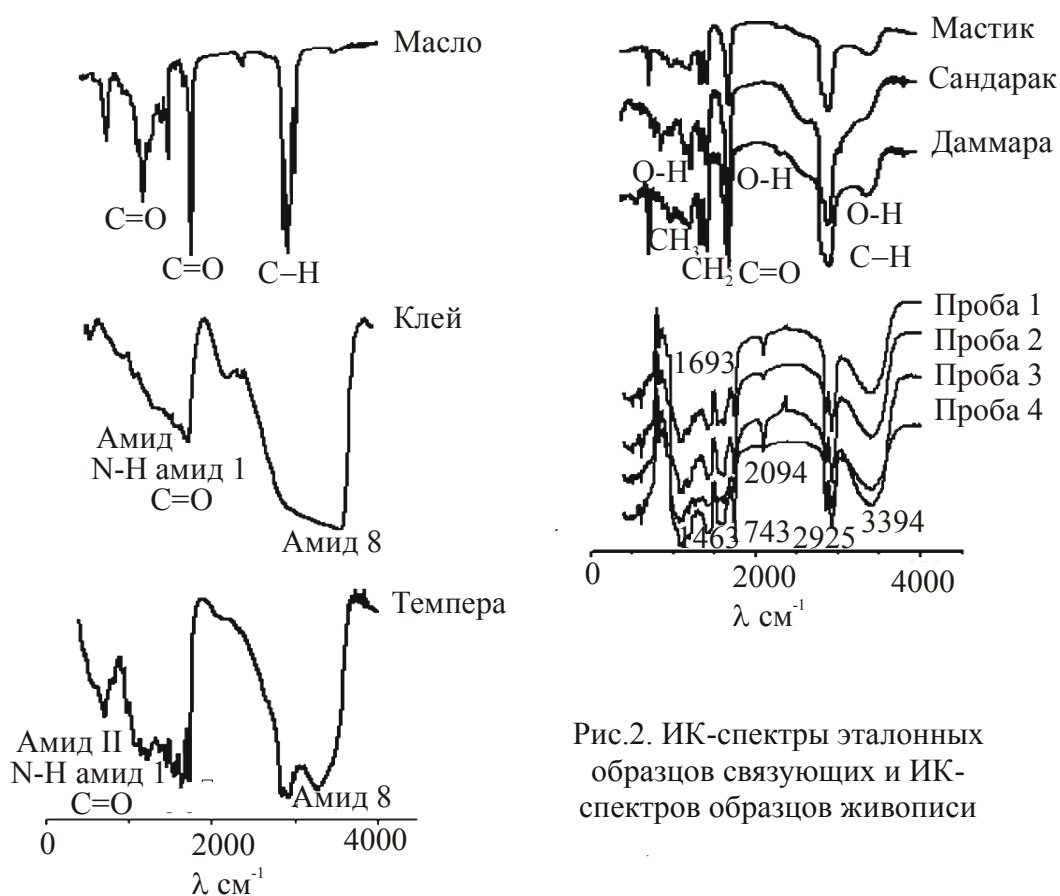


Рис.2. ИК-спектры эталонных образцов связующих и ИК-спектров образцов живописи

Таким образом, изучение спектров модельных образцов, а также микропроб живописи, позволило сделать вывод, что данный метод может быть использован для быстрой идентификации как класса связующего, так и определения внутри его. Основное преимущество метода состоит в том, что, используя минимальное количество пробы, можно достаточно легко и быстро получить максимум информации не только о классе и химическом составе связующих, но и о структуре вещества. Хотя последнее еще нуждается в более детальном исследовании.

Литература

1. *Сущинский М. М.* Комбинационное рассеяние света и строение вещества. – М. Наука, 1981.;
2. Технология, исследование и хранение произведений станковой и настенной живописи / под редакцией Ю. И. Гренберга – М.: «Изобразительное искусство», 1987г.

ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМАГНЕТИЗМА ВОДОРОДА В НАНОПОРИСТОМ АЛМАЗЕ

А. О. Коробко

В последнее время растет интерес к взаимодействию водорода с углеродными материалами, в частности, благодаря возможному применению нанотрубок, пористого графита или графитовых пленок для технологий запасаения водорода [1]. Меньшее внимание уделяется внедрению водорода в углеродные материалы с кубической алмазной структурой из-за сложности интерпретации результатов. Однако данная проблема, несомненно, заслуживает особого внимания, особенно, если учесть тот факт, что водород является одной из наиболее распространенных атомных примесей в алмазе [2].

В связи с развитием технологий синтетических алмазов все более актуальным является их использование в опто- и микроэлектронике. Например, CVD (осаждения из паровой фазы) алмазы по всем основным параметрам (содержание примесей, теплопроводность, низкие оптические и акустические потери, химическая и радиационная стойкость) не уступают и даже превосходят лучшие природные монокристаллы. Они успешно применяются для изготовления теплоотводов, оптических окон, рентгеновских диафрагм, датчиков ионизирующего излучения.

Поэтому нанопористые алмазные пленки хорошо подходят для исследования водорода на алмазной поверхности, в том числе и после обработки в водородной плазме. Они весьма перспективны для создания твердотельных водородных аккумуляторов. Гидрогенизация делает ал-