



XVI

**Международная школа-конференция
"Проблемы физики твердого тела
и высоких давлений"**

**Идеи и методы
физики
конденсированного
состояния, II**

**Сочи, пансионат "Буревестник"
15-25 сентября 2017г.**

ТЕЗИСЫ

XVI Международная школа-конференция
"Проблемы физики твердого тела
и высоких давлений"

Идеи и методы
физики конденсированного состояния
II

Сочи, пансионат "Буревестник"
15 - 25 сентября 2017г.

тезисы

Москва, ФИАН 2017

ТРЕХЧАСТИЧНЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМАХ

Галимзянов Б.Н., Мокшин А.В.

*Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Институт физики, Казань, Россия
bulatgnmail@gmail.com*

Определение трехчастичных корреляций для описания структуры неупорядоченных конденсированных систем является одной из актуальных задач [1-3]. Учет трехчастичных корреляций необходим, например, для объяснения динамической неоднородности в жидкостях, для описания транспортных свойств в химических реакциях, для описания процесса аморфизации жидкостей при быстром охлаждении [1-4].

Прямая оценка трехчастичных корреляций с помощью экспериментальных измерений - чрезвычайно сложная задача [4]. Детальная информация о трехчастичных корреляциях может быть получена на основе данных моделирования атомной и молекулярной динамики. Как правило, при оценке трехчастичных корреляций, применяются вычисления, основанные на суперпозиционном приближении Кирквуда, где рассматриваются парные корреляции между тремя произвольными атомами [1, 2].

В настоящей работе предлагается оригинальный метод трехчастичного структурного анализа, в котором рассматриваются произвольные траектории движения трех различных атомов. Метод позволяет идентифицировать наличие упорядоченных кристаллических и «стабильных» неупорядоченных структур, которые трудно обнаружить традиционными методами структурного анализа (например, методами многогранников Вороного, триангуляции Делоне). Применимость этого метода продемонстрирована для случая жидкого и аморфного алюминия [2].

Нами выполнено моделирование атомарной динамики жидкого и аморфного алюминия с использованием потенциала межчастичного взаимодействия EAM [2]. Рассматриваемая система содержит 864 атомов, расположенных в кубической симуляционной ячейке с периодическими граничными условиями. С геометрической точки зрения, расположение любых трех атомов порождает треугольник - триплет. Этот триплет характеризуется площадью S . Для

определения вероятности появления триплетов с площадью S нами вводится трехчастичная корреляционная функция [2]

$$g(S) = \frac{1}{N_T} \sum_{i=1}^{N_T} \delta(S - S_i), \quad (1)$$

где N_T - есть количество триплетов в системе.

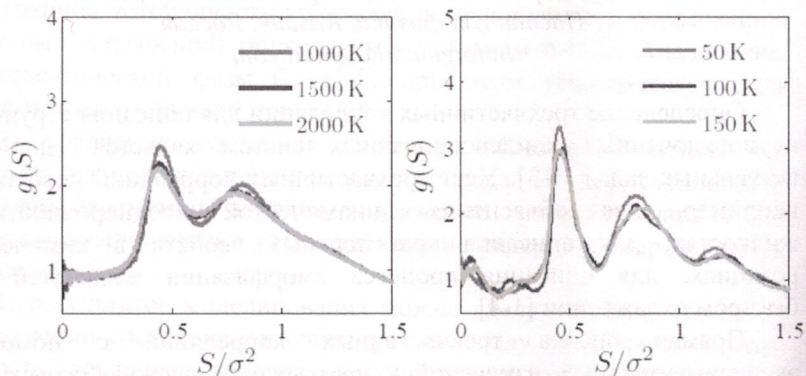


Рис. 1. Трехчастичная корреляционная функция $g(S)$ для жидкого (левая панель) и аморфного (правая панель) алюминия

Различные конфигурации триплетов обнаружены через расчет трехчастичной корреляционной функции $g(S)$ (см. рис. 1). Так, в случае жидкого алюминия с температурой 1000 К, 1500 К и 2000 К трехчастичные корреляции более выражены в пространственных масштабах, сравнимых с размером второй координационной сферы. В случае аморфного алюминия с температурой 50 К, 100 К и 150 К эти корреляции проявляются вплоть до пространственных масштабов, сравнимых с размером третьей координационной сферы. При этом временная эволюция трехчастичных корреляций в жидком и аморфном алюминии может быть восстановлена из перехода между триплетами различных конфигураций [2].

Работа поддержана грантом для молодых ученых Российской Федерации: MD-5792.2016.2.

Литература

1. K. Zahn, G. Maret, C. Ruß, H. H. von Grunberg, Phys. Rev. Lett. **91**, 115502, **2003**
2. B. N. Galimzyanov, A. V. Mokshin, Physica A, **478**, 103, **2017**

3. M. M. Hurley, P. Harrowell, J. Chem. Phys., **105**, 10521, **1996**
4. P. A. Egelstaff, D. I. Page, C. R. T. Heard, Phys. Lett. A, **30**, 376, **1969**

УГЛОВЫЕ ЗАВИСИМОСТИ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННОГО СПИНОВОГО РЕЗОНАНСА В КОНДО-СИСТЕМЕ CeV_6 .

М.И. Гильманов¹, А.В. Семенов², Н.Е. Случанко², Н.Ю. Шицевалова³,
В.Б. Филипов³, С.В. Демишев^{1,2}

¹Московский Физико-Технический Институт, Россия

²Институт Общей Физики РАН, Россия

³Институт Проблем Материаловедения НАНУ, Украина
gilmanov@gpi.ru

Электронный спиновый резонанс (ЭСР) в сильно-коррелированных металлах представляет нетривиальное физическое явление, поскольку спиновые флуктуации, типичные для этого класса материалов, приводят к сильному уширению резонансной линии до фактически не наблюдаемых значений. Обнаружение ЭСР в антиферроквадрупольной (АФК) фазе металлической концентрированной Кондо-системы CeV_6 [1] предоставило уникальную возможность исследования магнитного состояния иона Ce^{3+} и проверки недавно разработанной теории [2].

В данной работе угловые зависимости параметров линии электронного спинового резонанса (ширина линии и g-фактор) были экспериментально исследованы на частоте $f=60$ GHz [3]. Угловые зависимости $g(\theta)$, полученные при различных температурах, были проанализированы в рамках теории предполагающей основное состояние иона Ce^{3+} в АФК фазе CeV_6 типа Γ_8 [2]. Было обнаружено, что экспериментальные значения g-фактора при всех углах оказываются значительно меньше, чем рассчитанные теоретически ($2 < g < 2.2$), и более того, экспериментальные и теоретические зависимости обладают различной симметрией. При этом значения g-фактора для направлений [110] и [111] оказываются достаточно