

8.6. Мультимасштабное моделирование свойств атомно-молекулярных систем и наноструктурных материалов

Е.В.Ткаля. tkalya@srd.sinp.msu.ru

1. В рамках квантово-механического *ab initio* подхода на базе метода Хартри-Фока рассчитана вероятность захвата орбитального электрона ядром ${}^7\text{Be}$ в процессе сжатия кристалла ${}^7\text{BeO}$ и геля ${}^7\text{Be}(\text{OH})_2$. Полученное в результате расчета увеличение скорости распада ${}^7\text{Be}$ оказалось существенно меньше измеренного в экспериментах. В процессе анализа возможных причин обнаруженного расхождения, во-первых, был выявлен ряд проблем в методике измерений и в представлении результатов, а во-вторых, предприняты попытки использования других физических моделей процесса. В частности, мы продемонстрировали, что увеличение вероятности электронного захвата в ${}^7\text{BeO}$ может быть вызвано фазовым переходом в кристаллической решетке ${}^7\text{BeO}$ от структуры вюрцита к решетке типа поваренной соли.
2. Новые кубические метастабильные фазы редкоземельных элементов $\text{YbGe}_{2.85}$, $\text{TbGe}_{2.85}$, $\text{DyGe}_{2.85}$, кристаллизованных в структуру типа AuCu_3 , синтезированы под давлением 8 ГПа. С помощью ядерного метода дифференциальных возмущенных угловых корреляций (ВУК) измерены значения градиента электрического поля (ГЭП) на ядре Cd , который внедряется узел редкоземельного элемента. ГЭП измерялся 1) при комнатной температуре в зависимости от давления, при этом максимальное давление составило 8 ГПа и 2) при нормальном давлении, понижая температуру до 4 К в случае $\text{YbGe}_{2.85}$ и 77 К для остальных соединений. Обнаружено, что ГЭП и квадрупольная частота ВУК оставались практически постоянными при изменении температуры. При изменении давления в $\text{YbGe}_{2.85}$, однако, происходило изменение и ГЭП и квадрупольной частоты. Связав это изменение с валентностью, было найдено, что валентность Yb меняется с 2.46 при нормальных условиях до 2.89 при 8 ГПа.
3. Проанализированы возможные режимы распространения самоподдерживающейся волны высвечивания долгоживущих ядерных изомеров, инициируемой переходами на близлежащий короткоживущий уровень за счет поглощения рентгеновских квантов и неупругих столкновений электронов в плазме. Установлено, что в случае, когда обмен энергией между ядерной подсистемой и плазмой обусловлен процессами поглощения и излучения фотонов, волна высвечивания может идти в режиме быстрой (с околосветовой скоростью) дефлаграции, вызванной радиационным механизмом передачи тепла. В условиях, когда обмен энергией между подсистемами происходит безызлучательным путем, актуальным становится (менее быстрый) режим детонации. Реализация каждого из двух режимов требует выполнения определенных условий на характеристики системы.
4. Предложен эффективный и быстрый метод получения инверсной заселенности между квадрупольными подуровнями основного $5/2^+(0.0)$ и изомерного $3/2^+(7.6 \text{ эВ})$ состояний ядра ${}^{229}\text{Th}$ (см. Рис.1) в диэлектрическом кристалле с большой шириной запрещенной зоны с помощью лазерного излучения по стандартной для лазерной накачки Λ -схеме. Метод основан на депопуляции верхних подуровней основного состояния в ${}^{229}\text{Th}$ при воздействии резонансных фотонов узкополосного лазера. Роль промежуточных состояний при этом выполняют подуровни изомерного состояния (Рис.1). Кроме этого рассмотрен случай возбуждения изомерного состояния (без создания инверсной заселенности) широкополосным лазером с учетом антистоксовского рассеяния. Рассмотренная схема оптической накачки позволяет получить инверсную заселенность ядерных подуровней без использования сверхнизких

температур и открывает путь к созданию гамма-лазера оптического диапазона на ядерном переходе в ^{229}Th в кристаллах с изовалентным замещением ионами $^{229}\text{Th}^{4+}$ ионов-хозяев (например $\text{Th}:\text{SiO}_2$) и в кристаллах типа Na_2ThF_6 , где замещение не нужно.

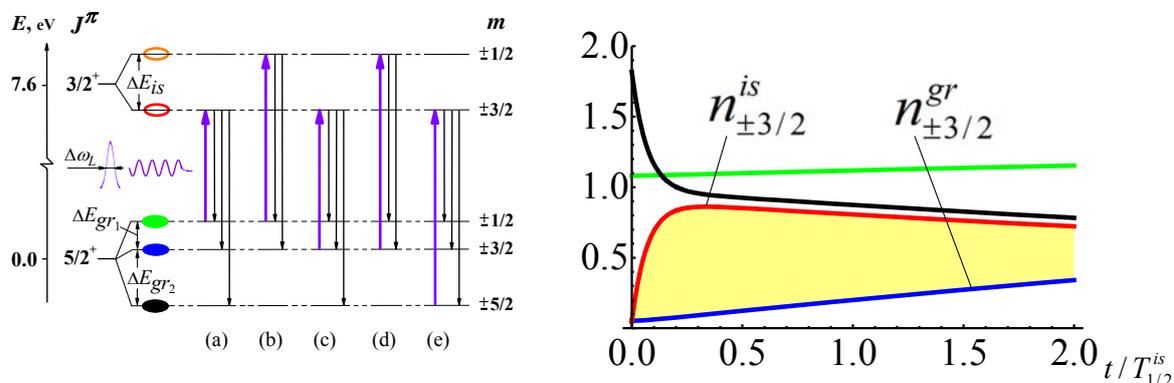


Рис.1. Схемы оптической накачки изомерного состояния $3/2^+$ (7.6 эВ) в ядре ^{229}Th лазерным излучением (левый рисунок) и область инверсной заселенности между подуровнями с $m = \pm 3/2$ изомерного и основного состояний (правый рисунок).

В работе принимали участие:

Авдеенков А.В., Бибиков А.В., Бодренко И.В., Николаев А.В., Ткаля Е.В.

Работа отражена в публикациях:

1. A.V. Bibikov, A.V. Avdeyenko, I.V. Bodrenko, A.V. Nikolaev and E.V. Tkalya. *Theoretical study of the pressure effect on the electron-capture β decay of ^7Be in ^7BeO and $^7\text{Be}(\text{OH})_2$* // Physical Review C, 2013, vol. **88**, N 3, 034608 (5).
2. A.V. Tsvyashchenko, A.I. Velichkov, A.V. Salamatin, L.N. Fomicheva, D.A. Salamatin, G. K. Ryasny, A.V. Nikolaev, M. Budzynski, R.A. Sadykov, and A.V. Spasskiy. *^{111}Cd -TDPAC Study of Pressure Effect on the Valence of Yb in the $\text{YbGe}_{2.85}$ Cubic Phase.* // Journal of Alloys and Compounds, 2013, vol. **552**, pp. 190–194.
3. Р.В. Арутюнян, Е.В. Ахрамеев, Л.А. Большов, П.С. Кондратенко, Е.В. Ткаля. *О возможности реализации волн горения и детонации в системе ядерных изомеров.* // Письма в Журнал Экспериментальной и Теоретической Физики, 2013, том **98**, N 11, с. 772-775.
4. E.V. Tkalya and L.P. Yatsenko. *Creation of inverse population in the ^{229}Th ground-state doublet by means of a narrowband laser* // Laser Physics Letters, 2013, vol. **10**, N 11, 105808.