

2-Теория и физика твердого тела

Авакян Леон Александрович, 4 курс

Ростовский государственный университет, физический

Определение структуры координационного окружения атомов переходных металлов в аморфных соединениях с помощью околопороговой структуры рентгеновских спектров поглощения

Научный руководитель: Бугаев Лусеген Арменакович, д. ф.-м. н, профессор, физический РГУ

Адрес: 344010 г. Ростов-на-Дону, ул. Красноармейская, 63/1, кв. 32

Телефон: (8632) 34-87-65

E-Mail: LAvakyan@Rambler.ru стр. 134

Авдеев Сергей Фёдорович, магистрант

Воронежский Государственный Технический Университет, физико-технический

Магниторезистивный эффект гранулированных нанокompозитов

Научный руководитель: Стогней О.В., к. ф.-м. н, доцент, ВГТУ каф. ФТТ

Адрес: 394026 Воронеж, Московский проспект, 14

E-Mail: Kalinin@ns1.vstu.ac.ru стр. 442

Алиев Расул Абдурвхманович, Соискатель ученой степени

ФТИ им. Иоффе СПбНЦ РАН, фазовые переходы в твердом теле (лаборатория)

Влияние размера зерен на фазовый переход металл-полупроводник в тонких поликристаллических пленках диоксида ванадия.

Научный руководитель: Шадрин Евгений Борисович, д. ф.-м. н, Зав. лабораторией, ФТИ им. Иоффе

Адрес: 194021. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

E-Mail: sheyh@rambler.ru стр. 134

Асылгужина Гульфия Назыргалеевна, молодой ученый

Стерлитамакский государственный педагогический институт, физический

Структурное разупорядочение в суперионной фазе твердых растворов на основе селенида меди

Научный руководитель: Биккулова Нурия Нагимьяновна, к. ф.-м. н, доцент, кафедры общей физики физико-математического СГПИ

Адрес: 453103, Башкортостан, г. Стерлитамак, пр. Ленина, 37, СГПИ, физ.-мат. ф.-т, к. 216

Телефон: (3473) 43-28-22

E-Mail: gul75@mail.ru стр. 136

Афанасьев Михаил Михайлович, аспирант

Воронежский Госуниверситет, физический

Атомная структура полупроводникового соединения Cd₃As₂

Научный руководитель: Алейникова Ксения Борисовна, к. ф.-м. н, Доцент, Воронежский Госуниверситет

Адрес: 394052, Воронеж, Чапаева, 126, 31.

Телефон: (0732) 20-88-05

E-Mail: mike@phys.vsu.ru стр. 137

Балин Михаил Андреевич, 5 курс

Пензенский Государственный университет, естественнонаучный

Управление электрофизическими свойствами сегнетокерамики типа ЦТС

Научный руководитель: Аверин Игорь Александрович, к. ф.-м. н, доцент, кафедра микроэлектроники

Пензенского Государственного университета

Адрес: 440026 г. Пенза, ул. Красная, 40

Телефон: (8412) 36-82-61

E-Mail: micro@diamond.stup.ac.ru стр. 138

Батищева Светлана Николаевна, магистрант

Воронежский Государственный Университет, физический

Моделирование атомной структуры тонких аморфных плёнок нормальных фосфидов цинка и кадмия

Научный руководитель: Алейникова Ксения Борисовна, к. ф.-м. н, доцент, ВГУ, физический, кафедра ФТТ

Адрес: 394006, г. Воронеж, Университетская пл., 1, ВГУ, физический, кафедра ФТТ

Телефон: (0732) 20-88-05

E-Mail: zinchenko@phys.vsu.ru стр. 140

Бимбаев Даши Дамдин-Цыренович, 2 курс

Бурятский государственный университет, физико-технический

Пластическая деформация в модели возбужденных атомов.

Научный руководитель: Баинова Альбина Борисовна, ассистент, кафедра общей физики, Бурятский госуниверситет

Адрес: 670000, г. Улан-Удэ, ул. Смолина 24а, БГУ, деканат ФТФ

E-Mail: abain76@list.ru стр. 142

Блинов Олег Александрович, 4 курс

Челябинский Государственный Педагогический Университет, физический

Роль примеси в формировании дендритных кристаллов

Научный руководитель: Брызгалов Александр Николаевич, д. ф.-м. н, Профессор, Челябинский

Государственный Педагогический Университет

Адрес: 454085 г. Челябинск, ул. Кирпичная, дом 61/2

E-Mail: blinova@74.ru стр. 143

Блошкин Алексей Александрович, 4 курс

Новосибирский государственный университет, физический

Проводимость массива квантовых точек Ge/Si в магнитном поле

Научный руководитель: Якимов Андрей Иннокентиевич, д. ф.-м. н, ведущий научный сотрудник,

Институт физики полупроводников СО РАН

Адрес: 630090 г. Новосибирск, ул. Пирогова 18 к 522

E-Mail: bloshkin@mail.ru стр. 448

Бляблин Владимир Александрович, 3 курс

Владимирский государственный университет, Ф. радиофизики, электроники и медицинской техники

Математическое моделирование ВАХ многослойной структуры металл-полупроводник-металл

Научный руководитель: Устюжанинов Валерий Николаевич, доктор технических наук, профессор,

Владимирский государственный университет

Адрес: 600035, Владимир, ул. Соколова-Соколенка, д. 17А, кв. 121

Телефон: (0922)30-43-19

E-Mail: neon@vladimirpeople.com стр. 145

Болеста Алексей Владимирович, м. н. с.

Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, Лаборатория физики быстропротекающих процессов

Молекулярно-динамическое моделирование синтеза InGaAs/GaAs нанотрубок

Научный руководитель: Фомин Василий Михайлович, чл.-корр. РАН, директор, Институт теоретической и прикладной механики СО РАН

Адрес: ИТПМ СО РАН, ул. Институтская 4/1, Новосибирск, 630090

Телефон: (3832) 30-38-04

E-Mail: bolesta@itam.nsc.ru стр. 147

Бондарев Виталий Сергеевич, м. н. с.

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, физический

Исследования термодинамических свойств керамики Ba_{0.92}Ca_{0.08}Ti_{0.76}Zr_{0.24}O₃

Научный руководитель: Флёров Игорь Николаевич, д. ф.-м. н, Руководитель теплофизической группы кристаллофизик, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Адрес: 660017 г. Красноярск ул. Урицкого 125 кв 61

Телефон: (3912) 49-45-07

E-Mail: vbondarev@yandex.ru стр. 149

Борщ Надежда Алексеевна, аспирант
ГОУ ВПО Воронежский государственный университет, физический
Электронная структура кремниевых и кремниво-бариевых клатратов
Научный руководитель: Переславцева Н.С., к. ф.-м. н, ст. преподаватель, ГОУ ВПО Воронежская государственная технологическая академия
Адрес: 394006, университетская пл. 1
Телефон: (0732) 74-38-07
E-Mail: phssd18@main.vsu.ru стр. 150

Бузмаков Алексей Владимирович, 4 курс
МГУ им. М.В. Ломоносова, физический
"Рентгеновская томография с субмиллиметровым разрешением на длинах волн 0,7-2.29 Å."
Научный руководитель: Асадчиков В.Е., д. ф.-м. н, зав. сектором, Институт кристаллографии РАН
Адрес: 119234 г. Москва. Воробьевы горы ДС МГУ корп `В` ком 342
E-Mail: zju@yandex.ru стр. 151

Бутягин Александр Алексеевич, аспирант
Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Институт математики, физики и информатики
Залечивание трещин в щелочногалоидных кристаллах при внешнем воздействии
Научный руководитель: Федоров Виктор Александрович, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой общей физики, Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина
Адрес: 392622, Тамбов, ул. Интернациональная 33, ТГУ, кафедра общей физики.
Телефон: (0752) 35-26-14
E-Mail: feodorov@tsu.tmb.ru стр. 153

Васильева Александра Владимировна, 3 курс
Воронежский государственный технический университет, физико-технический
Исследование сегнетоэластического фазового перехода в монокристалле K2Ba(NO2)4
Научный руководитель: Иванов Олег Николаевич, д. ф.-м. н, Профессор, Кафедра физики твердого тела Воронежского государственного технического университета
Адрес: 394026 Воронеж, московский пр-т, 14
Телефон: (0732) 46-66-47
E-Mail: vasiasialex@mail.ru стр. 154

Вильчинская Светлана Сергеевна, аспирант
Томский Политехнический Университет, Электрофизический
Радиационные дефекты в щелочно-галондных кристаллах с примесью йода
Научный руководитель: Лисицын Виктор Михайлович, д. ф.-м. н, профессор, Томский политехнический университет, электрофизический, кафедра лазерной и световой техники
Адрес: 634050, г.Томск, пр. Ленина 30
Телефон: (3822) 41-89-14
E-Mail: svetvil@mail2000.ru стр. 549

Воробьев Дмитрий Александрович, ассистент
Нижегородский государственный педагогический университет, физический
Применение теории фононной силы трения к исследованию поляронного эффекта в полупроводниках
Научный руководитель: Ефремов Геннадий Фёдорович, д. ф.-м. н, Профессор кафедры квантовой радиофизики, Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского
Адрес: Нижний Новгород, ул. Бекетова, д.6, кв. 531
Телефон: (8312)36-40-32
E-Mail: vorobyev@nnsru.ru стр. 155

Галлямова Эльвира Рафаэлевна, 5 курс
Башкирский Государственный Университет, физический
Электронная проводимость и термо-эдс в нестехиометрическом суперионном проводнике Li0,25Cu1,75-xSe

Научный руководитель: Балапанов М.Х., к. ф.-м. н, доцент кафедры общей физики, Башкирский Государственный Университет
Адрес: 450074 г.Уфа ул.Фрунзе д.32 БашГУ каф.общей физики Зиннуров И.Б.
Телефон: (3472) 22-16-45
E-Mail: GallyamovaGR@rambler.ru стр. 156

Гимазов Азат Альбертович, 5 курс
Башкирский государственный университет, физический
Компьютерное моделирование тройных стыков границ зерен
Научный руководитель: Назаров Айрат Ахметович, д. ф.-м. н, ,
Адрес: 450015 г. Уфа, ул Карла Маркса дом 54 кв.91
Телефон: (3472) 51-85-78
E-Mail: gimazov@ufacom.ru стр. 158

Головнева Елена Игоревна, м. н. с.
Институт теоретической и прикладной механики СО РАН, лаборатория физики быстропротекающих процессов
Численное исследование разрушения бездефектного нанокластера меди
Научный руководитель: Головнев Игорь Федорович - 1, Фомин Василий Михайлович -2, 1 - к.ф.-м.н., 2 - д.ф.-м.н., 1 - с.н.с., 2 - директор, Институт теоретической и прикладной механики
Адрес: Новосибирск, ул.Институтская 4/1
Телефон: (3832)30-38-04
E-Mail: elena@itam.nsc.ru стр. 160

Гончиков Константин Викторович, м. н. с.
Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Лаборатория физики прочности
Особенности локализации макродеформации в монокристаллах чистых ГЦК и ГПУ металлов
Адрес: 634021 пр. Академический 2/1
Телефон: (3822) 28-68-62
E-Mail: gkv@ispms.tsc.ru стр. 162

Гордина Олеся Сергеевна, 5 курс
Челябинский государственный университет, физический
Расчет теоретических рентгенограмм графана и анализ возможности его экспериментального обнаружения
Научный руководитель: Беленков Е.А., д. ф.-м. н, профессор, Челябинский государственный университет
Адрес: 454021, Челябинск, ул. Братьев Кашириных 129, ЧелГУ, физфак
Телефон: (3512) 42-03-47
E-Mail: belenkov@csu.ru стр. 163

Григорьев Григорий Алексеевич, аспирант
Алтайский Государственный Университет, ФТФ
Влияние пористости на диссипацию механической энергии в пористой меди
Научный руководитель: Поляков Виктор Владимирович, Профессор, Зав. кафедрой, Алтайский Государственный Университет
Адрес: 656099, Россия, Барнаул, проспект Ленина 61, ФТФ, кафедра Медицинской физики и прикладной электроники. Григорьеву Г.А.
E-Mail: grigorev2003@mail.ru стр. 166

Деева Юлия Викторовна, 5 курс
Воронежский государственный университет, физический
Электронная структура квантовой нити кремния в кластерном приближении
Научный руководитель: Тимошенко Ю.К., к. ф.-м. н, доцент кафедры оптики и спектроскопии,
Воронежский госуниверситет
Адрес: 394006, Россия, г. Воронеж, Университетская площадь 1, кафедра оптики и спектроскопии,
Девой Ю.В.
E-Mail: phopt131@main.vsu.ru стр. 167

Дейч Денис Борисович, аспирант
Воронежский государственный технический университет, физико-технический
Влияние концентрации межзельных атомов на структурное разупорядочение ГЦК металлов
Научный руководитель: Косилов Александр Тимофеевич, д. ф.-м. н, Зав.кафедрой материаловедения и физики металлов, Воронежский государственный технический университет
Адрес: 394068 г.Воронеж, ул.Хользунова д.3 кв.77
Телефон: (0732)75-57-26
E-Mail: morgenkorzh@yandex.ru стр. 169

Демченко Олеся Александровна, аспирант
НИИ физики Ростовского государственного университета, физический
Структура и свойства тройной системы твердых растворов $PbTiO_3 - PbZrO_3 - PbNb_{1/3}Bi_{2/3}O_3$.
Научный руководитель: Резниченко Лариса Андреевна, доктор, Заведующая отделом активных материалов, НИИ физики Ростовского государственного университета
Адрес: 344090 г. Ростов-на-Дону, ул. Стачки, 194, к. 307.
Телефон: (8632) 43-40-66
E-Mail: olesia_demch@mail.ru стр. 170

Дядькин Вадим Александрович, 4 курс
Воронежский технический государственный университет, физико-технический
Особенности поведения низкочастотных упругих и неупругих свойств релаксорного сегнетоэлектрика $PbMg_{1/3}Nb_{2/3}O_3$ в области размытого фазового перехода
Научный руководитель: Иванов Олег Николаевич, д. ф.-м. н, профессор кафедры ФТТ, ВГТУ
Адрес: 394091, Воронеж, Ростовская 61-187
Телефон: (0732)37-47-39
E-Mail: fripp@voronezh.net стр. 172

Ефимченко Вадим Сергеевич, 5 курс
Тамбовский государственный университет им.Г.Р.Державина, институт математики, физики, информатики
Диссипация энергии и микромеханизмы массопереноса при динамическом микро- и наноиентировании твердых тел
Научный руководитель: Тюрин А.И., к. ф.-м. н, доцент, ТГУ
Адрес: 392622, Россия, г.Тамбов, ул.Интернациональная 33, ТГУ им.Г.Р.Державина
Телефон: (0752)71-03-07
E-Mail: tyurin@tsu.tmb.ru стр. 175

Жиляков Дмитрий Геннадьевич, аспирант
Воронежский государственный технический университет, физико-технический
Молекулярно-динамическое моделирование процесса формирования и эволюции дефектной структуры пленочной гетеросистемы $Cu/Ni(001)$
Научный руководитель: Косилов Александр Тимофеевич, д. ф.-м. н, профессор, ВГТУ
Адрес: 394026 Воронеж Московский пр-т 14
Телефон: (0732) 46-66-47
E-Mail: dimitrihouse@mail.ru стр. 176

Иванов Владимир Сергеевич, 5 курс
Витебский Государственный Университет им. П.М. Машерова, физический
Неустойчивость в нелинейных системах со спектром осцилляторного типа.
Научный руководитель: Николай Сергеевич Буйнов, к. ф.-м. н, оцент кафедры общей и теоретической физики, ВГУ им. П.М. Машерова
Адрес: Республика Беларусь, 210036 г.Витебск, Московский проспект, д.33 ВГУ-физфак
Телефон: (0212) 27-06-35
E-Mail: buin@mail.ru стр. 67

Иванов Иван Алексеевич, аспирант
Московский Институт Стали и Сплавов, физико-ХИМИЧЕСКИЙ
Кинетический фазовый переход при кристаллизации

Научный руководитель: Дуб Алексей Владимирович, Доктор наук, Заместитель проректора по НИР,
Московский Институт Стали и Сплавов
Адрес: 119049, Москва, В - 49, Ленинский проспект, д. 4, МИСиС
Телефон: (095)116-39-12
E-Mail: ia_ivanov@mail.ru стр. 177

Казаков Дмитрий Витальевич, аспирант
Сыктывкарский Государственный Университет, физический
Исследование структурных характеристик приповерхностных слоев кристалла методом стоячих рентгеновских волн
Научный руководитель: Пунегов В.И., д. ф.-м. н.,
Адрес: 167023 Республика Коми, г. Сыктывкар, ул. Коммунистическая, д.73, кв.16
E-Mail: kazakovdv@syktsu.ru стр. 180

Казимагомедов Рустам Муртузалиевич, аспирант
Дагестанский Государственный Университет, физический
Изготовление и свойства гетероструктур на основе оксида цинка
Научный руководитель: Рабаданов Рабадан Абдулкадырович, д. ф.-м. н, Заведующий кафедрой
Физической электроники, ДГУ
Адрес: г Махачкала ул М-Гаджиева 43а ДГУ 367025
E-Mail: aumaumahi@mail.ru стр. 181

Казимагомедов Рустам Муртузалиевич, аспирант
Дагестанский государственный университет, физический
Изготовление структур типа металл-ZnO и измерение их параметров.
Научный руководитель: Рабаданов Рабадан Абдулкадырович, д. ф.-м. н, профессор, Дагестанский
государственный университет
Адрес: 367000 г Махачкала ул. М-Гаджиева 43а ДГУ
E-Mail: aumaumahi@mail.ru стр. 182

Калимгулов Айрат Ринатович, аспирант
Башкирский Государственный Университет, Химико-технологический
Влияние винтовых супердислокаций на температурно-частотные характеристики кварцевых резонаторов
Научный руководитель: Чувывров Александр Николаевич, д. ф.-м. н, проф., зав. кафедрой
Адрес: 450077, а/я7607
Телефон: (3472)52-50-31
E-Mail: airat@nekto.ru стр. 184

Капранчикова Галина Александровна, магистрант
Воронежский государственный университет, физический
Изменение емкостных характеристик МДП и МДМ структур при воздействии сверхкоротких импульсов электромагнитного излучения
Научный руководитель: Терехов Владимир Андреевич, д. ф.-м. н, профессор, Воронежский
государственный университет, физический, кафедра физики твёрдого тела
Адрес: 394006, Воронеж, Университетская пл.1, Воронежский государственный университет,
физический
Телефон: (0732) 20-83-63
E-Mail: root@ftt.vsu.ru стр. 184

Карпенко Евгений Константинович, аспирант
Ростовский Государственный Университет, физический
Уточнение положения атомов Ва и Li в структуре Ва₄Li₂Nb₁₀O₃₀.
Научный руководитель: Крыштоп В.Г., к. ф.-м. н, доцент, Ростовский Государственный Университет
Адрес: 344034, г. Ростов-на-Дону, пр. Стачки 5, кв. 49
Телефон: (8632) 24-89-28
E-Mail: evkar@list.ru стр. 186

Китань Сергей Андреевич, м. н. с.
НТЦ ИАПУ ДВО РАН, лаб. технологии металл-полупроводниковых систем
Исследование морфологии пленок хрома, кобальта и силицида хрома на Si(111)
Научный руководитель: Плюснин Николай Иннокентьевич, д. ф.-м. н, зав. лаб., НТЦ ИАПУ ДВО РАН
Адрес: 690011, ул. Никифорова дом 10 кв. 160
Телефон: (4232) 29-91-13
E-Mail: kitan@iacp.dvo.ru стр. 473

Климентова Татьяна Игоревна, аспирант
Воронежский Государственный Технический Университет, физико-технический
Электропроводность аморфного материала на основе титаната свинца
Научный руководитель: Гриднев Станислав Александрович, д. ф.-м. н, профессор, Воронежский
Государственный Технический Университет, кафедра ФТТ
Адрес: 394026, Россия, Воронеж, Московский проспект, 14,
Телефон: (0732) 46-66-47
E-Mail: ferro@ns1.vstu.ac.ru стр. 186

Коваль Людмила Валерьевна, 5 курс
Дальневосточный Государственный Университет, физико-технический
Формирование границы раздела Si(111)/Fe при комнатной температуре по данным ДОС
Научный руководитель: Галкин Николай Геннадьевич, д. ф.-м. н, Зав. лаб `Оптики и электрофизики`,
ИАПУ ДВО РАН, Институт автоматики и процессов управления, ДВО РАН
Адрес: Владивосток, ул. Пограничная, 26
Телефон: (4232) 32-06-82
E-Mail: luda2603@phys.dvgu.ru стр. 580

Козулин Александр Анатольевич, магистрант
Томский государственный университет, физико-технический
Учет физических и геометрических нелинейностей при расчете конструкций из полимерных материалов
Научный руководитель: Скрипняк Владимир Альбертович, , ,
Адрес: 634050 г.Томск, пр.Ленина, 36
E-Mail: kozulyn@ftf.tsu.ru стр. 1184

Колесникова Анна Алексеевна, аспирант
Самарский государственный университет, физический
Явления инерции носителей заряда в гетероструктурах SiC/Si
Научный руководитель: Комов Александр Николаевич, д.т.н., зав. кафедрой ЭТТ, Самарский
государственный университет
Адрес: 443011, г.Самара, ул. Акад.Павлова,1, каф.ЭТТ
E-Mail: abp@mail15.com стр. 188

Копытин Михаил Николаевич, аспирант
Воронежский Государственный Технический Университет, физико-технический
Исследование ВАХ тонкопленочных наногранулированных композитов металл-диэлектрик в режиме сильного электрического поля
Научный руководитель: Стогней Олег Владимирович, к. ф.-м. н, доцент, Воронежский Государственный
Технический Университет, кафедра физики твердого тела
Адрес: 394007, г. Воронеж, Ленинский пр-т, д. 105/2, кв. 40
E-Mail: michaelkopitin@mail.ru стр. 189

Косырев Николай Николаевич, вед. инженер
Институт Физики СО РАН, лаб. Физики Магнитных Явлений
Исследование тонких пленок Fe методом эллипсометрии
Научный руководитель: Овчинников Сергей Геннадьевич, д. ф.-м. н, зам. директора, ИФ СО РАН
Адрес: г.Красноярск, Академгородок 50, Институт Физики
E-Mail: nick@iph.krasn.ru стр. 191

Кочкин Сергей Алексеевич, аспирант
Поморский государственный университет, физический
Методика вычислений энергетических спектров и температурных распределений выхода кластеров при ионном распылении металла
Научный руководитель: Матвеев Виктор Иванович, д. ф.-м. н, И.о. зав. кафедрой теоретической физики,
Поморский государственный университет
Адрес: 163009, г. Архангельск, ул. Октябрат, д. 4, корп. 3, кв. 46
E-Mail: skochkin@atnet.ru стр. 192

Кравченко Олег Юрьевич, 3 курс
НИИ физики Ростовского государственного университета, физический
Исследование ниобата серебра (AgNbO₃) в широком интервале температур и частот.
Научный руководитель: Резниченко Лариса Андреевна, Доктор, Заведующая отделом активных материалов, НИИ физики Ростовского государственного университета
Адрес: 344090 г. Ростов-на-Дону, ул. Стачки, 194, к. 307.
Телефон: (8632) 43-40-66
E-Mail: olukrav@mail.ru стр. 194

Кузнецова Анастасия Николаевна, магистрант
СПбГЭТУ, электроники
Определение энергетического спектра носителей заряда в гетероструктурах с квантовыми ямами InGaAs/GaAs
Научный руководитель: Зубков Василий Иванович, к. ф.-м. н, доцент кафедры микроэлектроники,
СПбГЭТУ
Адрес: 197372 ул. Туристская, д. 38, кв. 100, Санкт-Петербург
Телефон: (812)234-30-16
E-Mail: knastik@land.ru стр. 196

Куклин Василий Григорьевич, 5 курс
Пензенский Государственный университет, естественнонаучный
Особенности получения резистивных пленок на основе хромоникелевых сплавов
Научный руководитель: Аверин Игорь Александрович, к. ф.-м. н, доцент, кафедра микроэлектроники
Пензенского Государственного Университета
Адрес: 440026 г. Пенза, ул. Красная, 40
Телефон: (8412)36-82-61
E-Mail: micro@diamond.stup.ac.ru стр. 198

Кулдин Николай Александрович, аспирант
Петрозаводский государственный университет, физико-технический
Модель переключения структуры Si-SiO₂-VO₂
Научный руководитель: Стефанович Генрих Болеславович, д. ф.-м. н, зав. каф. геофизики,
Петрозаводский государственный университет
Адрес: 185640, Россия, Карелия, Петрозаводск, пр. Ленина 33
Телефон: (8142) 71-10-28
E-Mail: kuldin@psu.karelia.ru стр. 199

Куликов Олег Николаевич, инженер
Кубанский государственный университет, физико-технический
Кинетика накопления заряда неосновных носителей в транзисторных структурах с распределенным эмиттером
Адрес: 350063, г. Краснодар, пер. Подгорный, 8, кв.1
E-Mail: oleg_kulikov@pochtamt.ru стр. 201

Кургузова Елена Михайловна, аспирант
Пензенский государственный университет, Естественнонаучный
Прогнозирование выходных параметров соединений А4Б6
Научный руководитель: Аверин Игорь Александрович, к. ф.-м. н, доцент, Пензенский государственный университет

Адрес: 440026, Пенза, ул. Красная 40
Телефон: (8412) 63-85-29
E-Mail: micro@diamond.stup.ac.ru стр. 202

Кухарь Егор Иванович, 5 курс
Волгоградский государственный педагогический университет, физический
Магнетопоглощение звука квантовой нитью с параболическим потенциалом конфайнмента
Научный руководитель: Крючков С.В., д. ф.-м. н, заведующий кафедрой, Волгоградский
государственный педагогический университет
Адрес: 400064, г.Волгоград, ул. Рихарда Зорге, 51-141
Телефон: (8442)73-19-90
E-Mail: sed@fizmat.vspu.ru стр. 476

Лапшина Юлия Викторовна, 5 курс
Кемеровский Государственный Университет, физический
Синтез и исследование композиционных систем на основе микрокристаллов галогенидов серебра
Научный руководитель: Звиденцова Надежда Семеновна, Кандидат химических наук, доцент, КемГУ,
кафедра экспериментальной физики
Адрес: 650043 г.Кемерово, ул.Красная, д.6
Телефон: (3842) 58-31-95
E-Mail: www.natasha-g@list.ru стр. 204

Левицкая Елена Владимировна, 2 курс
ГОУ ВПО Воронежский Государственный университет, физический
Строение валентной зоны и спектральные характеристики моносилицидов рутения и осмия
Научный руководитель: Переславцева Наталия Сергеевна, к. ф.-м. н, старший преподаватель, ГОУ ВПО
ВГТА
Адрес: 394006, г. Воронеж, Университетская площадь д 1
E-Mail: phssd18@main.vsu.ru стр. 206

Лежнев Денис Владимирович, аспирант
ПГУ, ЕНФ
Влияние лазерного излучения на адгезионные характеристики тонкопленочных структур
Научный руководитель: Печерская Р.М., д.т.н., профессор, ПГУ
Адрес: 440031, г. Пенза, ул. Кижеватова, 28-131
E-Mail: big-ant@mail.ru стр. 207

Лемешко Михаил Петрович, 3 курс
Ростовский Государственный Университет, физический
Возможности метода многократного рассеяния при описании рентгеновских спектров поглощения кристаллов KNO_3 и $NaNO_3$
Научный руководитель: Ведринский Ростислав Викторович, д. ф.-м. н, Профессор КТВФ РГУ, РГУ
Адрес: 344090 Ростов-на-Дону, ул. Сладкова, д.85/1, кв. 18
Телефон: (8632) 92-54-75
E-Mail: vptv@narod.ru стр. 208

Лихач Надежда Ивановна, аспирант
Воронежский Государственный Университет, физический
Анализ атомной структуры легированных стёкол
Научный руководитель: Алейникова Ксения Борисовна, к. ф.-м. н, доцент, ВГУ, физический, кафедра
ФТТ
Адрес: 394006, г. Воронеж, Университетская пл.,1, ВГУ, физический, кафедра ФТТ
Телефон: (0732) 20-88-05
E-Mail: zinchenko@phys.vsu.ru стр. 210

Лукоянов Алексей Владимирович, 5 курс
УГТУ-УПИ, физико-технический
Низкотемпературные фонон-магнонные аномалии в $TiOCl$

Научный руководитель: Анисимов Владимир Ильич, профессор, д. ф.-м. н., зав. лабораторией оптики металлов, Институт Физики Металлов УрО РАН
Адрес: 620131 г. Екатеринбург ул. Викулова 43/2 кв.9
E-Mail: lukoyanov@optics.imp.uran.ru стр. 213

Лукоянов Алексей Владимирович, 5 курс
УГТУ-УПИ, физико-технический

Магнитный момент 3d-металлов в интерметаллидах GdTiGe и GdTiSi

Научный руководитель: Анисимов Владимир Ильич, профессор, д. ф.-м. н., зав. лабораторией оптики металлов, Институт Физики Металлов УрО РАН
Адрес: 620131 г. Екатеринбург ул. Викулова 43/2 кв.9
E-Mail: lukoyanov@optics.imp.uran.ru стр. 212

Ляхов Сергей Александрович, 5 курс

Воронежский государственный педагогический университет, физико-математический

Релаксация напряжений массивного металлического стекла на основе Pd в условиях изохронного нагрева.

Научный руководитель: Хоник Виталий Александрович, д. ф.-м. н., профессор, Воронежский государственный педагогический университет
Адрес: 394043, Россия, Воронеж, ул. Малотерновая 22 кв. 2
E-Mail: isa@vspsu.ac.ru стр. 214

Ляшков Павел Степанович, студент

Кемеровский государственный университет, физический

Подрешетки в кристаллах со структурой халькопирита

Научный руководитель: Поплавной Анатолий Степанович, д. ф.-м. н., заведующий кафедрой теоретической физики, Кемеровский государственный университет
Адрес: 650065, г. Кемерово, пр. Октябрьский, д. 80 г, кв. 19
E-Mail: lpspollps@mail.ru стр. 71

Майорова Мария Александровна, магистрант

Ростовский Государственный Университет, физический

Исследование аналитической структуры функции Грина многоатомных систем

Научный руководитель: Ведринский Ростислав Викторович, д. ф.-м. н.,
Адрес: 343091 г. Ростов-на Дону ул. 2-ая Краснодарская 143/1 кв.18
Телефон: (8632)43-32-71
E-Mail: mariam@phys.rsu.ru стр. 216

Макаров Виталий Владимирович, аспирант

Тверской государственный университет, физико-технический

Исследование процессов переполаризации монокристаллов ТГС, облученных сильноточным импульсным пучком электронов

Научный руководитель: Иванов Владимир Васильевич, к. ф.-м. н., зав. кафедрой физики сегнето- и пьезоэлектриков, Тверской государственный университет
Адрес: 170002, г. Тверь, Садовый пер. 35, каф. физики сегнето- и пьезоэлектриков
E-Mail: Vladimir.Ivanov@tversu.ru стр. 218

Маккаева Айша Асадулаевна, аспирант

Дагестанский Государственный Университет, физический

Фотохимические реакции в кристаллах CdSxSe1-x

Научный руководитель: Хамидов Марасилав Магомедович, к. ф.-м. н., доцент, Дагестанский Государственный Университет
Адрес: 368300 Республика Дагестан г. Каспийск ул. Ленина 48 кв.114,
E-Mail: ami_ff@mail.ru стр. 220

Мальцева Екатерина Александровна

Красноярский Государственный Университет

Синтез и исследование структурных и электрических свойств сульфидов Co_xMn_{1-x}S

Научный руководитель: Романова Оксана Борисовна, к.ф.-м.н
E-Mail: rob@iph.krasn.ru стр. 221

Морозова Татьяна Владимировна
Кемеровский Государственный Университет
Исследование поверхности эмульсионных микрокристаллов AgBr методом декорирования.
Научный руководитель: Колесников Лев Васильевич, д.ф.-м. наук, профессор
E-Mail: tania@kemsu.ru стр. 223

Мещерякова Елена Александровна, 5 курс
Кемеровский Государственный Университет, физический
Исследование химической сенсбилизации микрокристаллов бромида серебра
Научный руководитель: Звиденцова Надежда Семеновна, Кандидат химических наук, доцент, КемГУ,
кафедра экспериментальной физики
Адрес: 650043 г.Кемерово, ул.Красная, д.6
Телефон: (3842) 58-31-95
E-Mail: www.natasha-g@list.ru стр. 1246

Мыльникова Анастасия Сергеевна, 5 курс
УГТУ-УПИ, физико-технический
Расщепление кристаллическим полем d уровня иона Ti и его влияние на магнитные свойства LaTiO₃ и YTiO₃.
Научный руководитель: Анисимов Владимир Ильич, д. ф.-м. н, зав. лаб. оптики металлов, ИФМ УрО РАН
Адрес: Россия, Екатеринбург, 620050, п/о 50, а/я 111
Телефон: (3432) 54-39-60
E-Mail: mas@optics.imp.uran.ru стр. 226

Мыльникова Анастасия Сергеевна, 5 курс
УГТУ-УПИ, физико-технический
Пространственная локализация дырок в страйпах на основе La₂CuO₄.
Научный руководитель: Коротин М.А., к. ф.-м. н, с.н.с., ИФМ УрО РАН
Адрес: Екатеринбург, 620050, ул. Таватуйская, 19-16
Телефон: (3432) 54-39-60
E-Mail: mas@optics.imp.uran.ru стр. 224

Некрасов Игорь Александрович, старший научный сотрудник
Институт физики металлов УрО РАН, Лаборатория оптики металлов
Электронные корреляции. компьютерное моделирование: стратегия, приближения, результаты.
Научный руководитель: Анисимов Владимир Ильич, д. ф.-м. н, заведующий лабораторией, ИФМ УрО РАН
Адрес: 620219, Россия, Екатеринбург, ГСП-170, ул. С. Ковалевской 18
Телефон: (3432)78-38-14
E-Mail: nekrasov@optics.imp.uran.ru стр. 228

Некрасова Светлана Викторовна, 5 курс
ДВГУ (ИАПУ ДВО РАН), физико-технический
Исследование начальных стадий формирования оксида кремния
Научный руководитель: Игнатович Константин Викентьевич, к. ф.-м. н, старший научный сотрудник,
ИАПУ ДВО РАН
Адрес: 690090 г.Владивосток, ул. Пограничная, д. 26. к.631
Телефон: (4232)77-21-08
E-Mail: serzhpwr@mail.ru стр. 228

Никифорова Елена Владимировна, магистрант
Тверской государственной университет, физико-технический
Молекулярно-динамическое моделирование самоорганизации наноструктур при взаимодействии малых капель с поверхностью твердого тела

Научный руководитель: Самсонов Владимир Михайлович, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой теоретической физики, Тверской государственной университет
Адрес: 170021, г. Тверь, ул. Хрустальная, д. 36, кв. 159
Телефон: (0822) 55-76-27
E-Mail: Vladimir.Samsonov@tversu.ru стр. 351

Орлова Анна Николаевна, магистрант
Тверской государственной университет, физико-технический
Влияние высокотемпературного отжига на оптические свойства монокристаллов ниобата лития, подвергнутых различным дефектообразующим воздействиям.
Научный руководитель: Педько Б.Б., к. ф.-м. н, декан физико-технического факультета, Тверской государственной университет
Адрес: 170002 г. Тверь, Садовый пер., 35
E-Mail: s012833@tversu.ru стр. 606

Пасюкова Юлия Александровна, 4 курс
Челябинский государственный университет, физический
Моделирование структуры карбина
Научный руководитель: Беленков Е.А., д. ф.-м. н, профессор, Челябинский государственный университет
Адрес: 454021, Челябинск, ул. Братьев Кашириных 129, ЧелГУ, физфак
Телефон: (3512) 42-03-47
E-Mail: belenkov@csu.ru стр. 229

Патрушев Павел Павлович, 6 курс
Уральский государственный технический университет - УПИ, физико-технический
Изучение особенностей взаимодействия кристаллов LiH с атмосферой ядерно-физическими методами анализа
Научный руководитель: Рябухин Олег Владимирович, к. ф.-м. н, доцент, УГТУ-УПИ, каф. экспериментальной физики
Адрес: 624096, Свердловская обл., Верхняя Пышма, Уральских рабочих, 48а-4
Телефон: (3432) 75-44-10
E-Mail: prptrushev@mail.ru стр. 231

Пермякова Инга Евгеньевна, аспирант
Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина, Институт математики, физики и информатики
Изменения механических свойств и структуры металлического стекла на основе кобальта под воздействием термической обработки
Научный руководитель: Федоров Виктор Александрович, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой общей физики, Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина
Адрес: 392622, Тамбов, ул. Интернациональная 33, ТГУ, кафедра общей физики.
Телефон: (0752) 35-26-14
E-Mail: plushnik@mail.ru стр. 233

Перов Андрей Викторович, аспирант
Воронежский государственный технический университет, физико-технический
Магнитомеханические свойства аморфного сплава Fe₇₉ЗР₁₈2V₂5
Научный руководитель: Калинин Ю.Е., д. ф.-м. н, зав. кафедрой, Воронежский государственный технический университет
Адрес: 394026 Воронеж, Московский пр. 14, ВГТУ
E-Mail: andrewshok@list.ru стр. 235

Петрунёв Сергей Николаевич, аспирант
Сыктывкарский Государственный Университет, физический
Исследование проводимости тонких металлических плёнок
Научный руководитель: Котов Леонид Нафанаилович, д. ф.-м. н, Зав. кафедрой, Сыкт.ГУ
Адрес: 167002 г.Сыктывкар, Сысольское шоссе 70-57
E-Mail: petrynev.ssu@mail.ru стр. 236

Плаксицкий Андрей Борисович, аспирант
Воронежский государственный университет, физический
Пироэлектрические свойства кристаллов ТГС с примесью ионов Европия
Научный руководитель: Миловидова Светлана дмитриевна, к. ф.-м. н, доцент, ВорГУ
Адрес: 394000 Воронеж. Университетская пл. 1 физический, кафедра экспериментальной физики
Телефон: (0732)20-86-25
E-Mail: pab13@mail.ru стр. 239

Плаксицкий Андрей Борисович, аспирант
Воронежский государственный университет, физический
Электрофизические свойства кристаллов ТГС, выращенных при температурах ниже 0 С
Научный руководитель: Миловидова Светлана дмитриевна, к. ф.-м. н, доцент, ВорГУ
Адрес: 394000 Воронеж. Университетская пл. 1 физический, кафедра экспериментальной физики
Телефон: (0732)20-86-25
E-Mail: pab13@mail.ru стр. 238

Плаксицкий Андрей Борисович, аспирант
Воронежский государственный университет, физический
Свойства оксида алюминия с сегнетоэлектрическими включениями
Научный руководитель: Миловидова Светлана дмитриевна, кандидат физико-математических наук,
доцент, ВорГУ, физический, кафедра экспериментальной физики,
Адрес: 394000 Воронеж университетская пл. 1
Телефон: (0732)20-86-25
E-Mail: pab13@mail.ru стр. 240

Поверинова Галина Владимировна, 4 курс
Тамбовский государственный университет им. Г. Р. Державина, Институт математики, физики,
информатики
**Влияние скорости относительной деформации на коэффициент трещиностойкости при действии
высоких локальных напряжений**
Научный руководитель: Тюрин Александр Иванович, к. ф.-м. н, доцент, ТГУ
Адрес: 392622 Тамбов ул. Интернациональная 33
Телефон: (0752)71-03-07
E-Mail: tyurin@tmb.tsu.ru стр. 241

Подвинцев Александр Сергеевич, 5 курс
ГОУВПО Уральский Государственный Технический Университет-УПИ, физико-технический
**Люминесценция и радиационные дефекты в кристаллах алюминатов щелочно-земельных
металлов MA12O4 (M=Ca,Sr,Ba)**
Научный руководитель: Пустоваров Владимир Алексеевич, к. ф.-м. н, профессор, ГОУВПО Уральский
Государственный Технический Университет-УПИ
Адрес: г. Екатеринбург, ул. Мира 19, Кафедра экспериментальной физики
E-Mail: simpson13@bk.ru стр. 611

Полянский Дмитрий Александрович, аспирант
Дальневосточный государственный университет, физико-технический
Распределение зародышей меди по поверхности стеклоуглерода при электроосаждении
Научный руководитель: Крайнова Галина Сергеевна, к. ф.-м. н, доцент, ДВГУ, ИФИТ, кафедра ФОТИС
Адрес: 690600, г. Владивосток, ул. Суханова - 8, ДВГУ, ИФИТ, кафедра ФОТИС
Телефон: (4232) 26-07-06
E-Mail: rambo@ifit.phys.dvgu.ru стр. 243

Поярков Александр Александрович, 5 курс
Стерлитамакский гос. пед. институт, физико-математический
Особенности диффузии атомов переходных металлов в твердых растворах на основе никеля
Научный руководитель: Муллакаев Марат Салаватович, к. ф.-м. н, доцент, Стерлитамакский гос. пед.
институт

Адрес: 453124, ул. Пр. Октября д.11 кв.10
E-Mail: yag-ajrat@yandex.ru стр. 245

Протопопов Григорий Александрович, 5 курс
Московский инженерно -физический институт (Государственный университет), Автоматики и электроники
Изменение энтропии структур оксид кремния-кремний при радиационном облучении
Научный руководитель: Попов Виктор Дмитриевич, доктор технических наук, профессор кафедры микроэлектроники, МИФИ, каф микроэлектроники
Адрес: 115409 Москва.Каширское шоссе 31. МИФИ. каф Микроэлектроники
E-Mail: greg_aaa@mail.ru стр. 246

Пряхина Марина Эдуардовна, магистрант
Воронежский государственный технический университет, физико-технический
Особенности физических свойств сегнетоэлектриков с магнитным упорядочением
Научный руководитель: Иванов Олег Николаевич, д. ф.-м. н, Профессор, Кафедра физики твердого тела Воронежского государственного технического университета
Адрес: 394026 Воронеж, Московский пр-т, 14
Телефон: (0732) 46-66-47
E-Mail: marka_pr@mail.ru стр. 248

Пчёлкина Злата Викторовна, м. н. с.
Институт физики металлов УрО РАН, лаборатория оптики металлов
Вычисление параметров неэмпирического модельного гамильтониана для La_2CuO_4 в базисе функций Ванье
Научный руководитель: Анисимов Владимир Ильич, д. ф.-м. н, профессор, Институт физики металлов УрО РАН
Адрес: 620219, Екатеринбург, С. Ковалевской, 18
Телефон: (3432) 78-38-86
E-Mail: pzv@optics.imp.uran.ru стр. 250

Радченко Григорий Сергеевич, аспирант
Ростовский Государственный Университет, физический
Перколяция в гетерогенных упругих средах
Научный руководитель: Турик Анатолий Васильевич, д. ф.-м. н, профессор, зав. кафедрой, Ростовский Государственный Университет
Адрес: 344091 г. Ростов-на-Дону пр. Коммунистический 34/3 кв. 61
Телефон: (8632) 22-08-85
E-Mail: grig1980@mail.ru стр. 254

Ребецкий Александр Игоревич, 4 курс
Тверской государственный университет, физико-технический
Рентгеноструктурные исследования керамики системы цирконата - титаната свинца
Научный руководитель: Большакова Наталья Николаевна, к. ф.-м. н, доцент кафедры физики сегнето- и пьезоэлектриков, Тверской государственный университет
Адрес: 170002 Тверь, Садовый пер. 35, лаб. 55
E-Mail: s010140@tversu.ru стр. 255

Родина Ирина Сергеевна, магистрант
Ростовский Государственный Университет, физический
Изменение локальной структуры котодного материала Li-Ni-O в процессе заряда-разряда батарей
Научный руководитель: Солдатов Александр Владимирович, д. ф.-м. н, профессор, Ростовский Государственный Университет
Адрес: Ростов -на-Дону, Зорге 5, 344090
Телефон: (8632)22-08-70
E-Mail: xanes@phys.rsu.ru стр. 257

Родионов Максим Александрович, аспирант
Самарский государственный университет, физический
Электрофизические свойства структур металл-оксид диспрозия-оксид иттрия - кремний
Научный руководитель: Рожков Виктор Аркадьевич, д. ф.-м. н, профессор, Самарский государственный университет, физический, кафедра электроники твердого тела
Адрес: 443056, г. Самара, ул. Гая, д. 17, кв. 2.
Телефон: (8462)34-54-55
E-Mail: rodionow@rambler.ru стр. 258

Романов Николай Геннадьевич, 4 курс
Воронежский Государственный Технический Университет, физико-технический
Низкочастотные упругие и неупругие свойства манганита $\text{La}_2/3\text{Sr}_1/3\text{MnO}_3$ в окрестности температуры Кюри
Научный руководитель: Иванов Олег Николаевич, доктор наук, ведущий научный сотрудник,
Воронежский Государственный Технический Университет
Адрес: 394007 г. Воронеж ул. Ленинский проспект 115/19
Телефон: (0732) 27-51-66
E-Mail: nikolay83@list.ru стр.

Румянцев Иван Михайлович, аспирант
МИФИ (Московский инженерно-физический институт (государственный университет), Физика и экономика высоких технологий
Учет предела растворимости примеси при диффузии из истощающегося источника
Научный руководитель: Петров Валерий Иванович, к.т.н., доцент, МИФИ
Адрес: 115409, Москва, Каширское шоссе 31, деканата `Ф`
Телефон: (916) 672-66-06
E-Mail: ivanr@sim.ru стр. 260

Рыбакова Анастасия Александровна, 4 курс
ИГУ, физический
Влияние спектрального состава первичного излучения, размеров и ориентации частиц на интенсивность ее рентгеновской флуоресценции
Научный руководитель: Павлинский Гелий Винаминович, д. ф.-м. н, профессор, ИГУ
Адрес: 664003 г. Иркутск, б. Гагарина 20
E-Mail: pavlinsky@chem.isu.ru стр. 262

Самодуров Александр Алексеевич, аспирант
Тамбовский ГУ, ИМФИ
Распределение ловушек заряда в монокристаллах C60
Научный руководитель: Лопатин Дмитрий Валерьевич, к. ф.-м. н, доцент, ТГУ
Адрес: 392622 г. Тамбов Ул. Интернациональная 33
Телефон: (0752) 53-22-53
E-Mail: lopatin@tsu.tmb.ru стр. 263

Самохина Оксана Ивановна, аспирант
Воронежский Государственный Технический Университет, физико-технический
Влияние водорода на электрические свойства нанокристаллических пленок на основе сплава Sn-O-Y
Научный руководитель: Калинин Юрий Егорович, д. ф.-м. н, зав. кафедрой физики твердого тела,
Воронежский Государственный Технический Университет
Адрес: г. Воронеж, Московский пр-т, 179б, к.432
E-Mail: michaelkopitin@mail.ru стр. 265

Самсонов Сергей Владимирович, 6 курс
Воронежский государственный технический университет, физико-технический
Электрические свойства, магниторезистивный эффект и магнитные свойства нанокомпозитов $(\text{Co})_x+(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$

Научный руководитель: Калинин Юрий Егорович, д. ф.-м. н, Заведующий кафедрой физики твердого тела, Воронежский государственный технический университет
Адрес: 394042, Воронеж, Ленинский проспект, д. 152, кв. 56
Телефон: (0732)26-66-38
E-Mail: samsonov.serg@mail.ru стр. 267

Сангаджиева Гиляна Андреевна, аспирант
Российский Государственный Педагогический Университет им.А.И. Герцена, Физика
Магнитополевая зависимость коэффициента Холла в кристаллах полуметаллов со сложной структурой зон при различных соотношениях концентраций и подвижностей носителей заряда.
Научный руководитель: Грабов Владимир Минович, д. ф.-м. н, профессор, Российский Государственный Педагогический Университет им.А.И.Герцена
Адрес: 192007, г.Санкт-Петербург, проспект Лиговский д.275, ком.418
E-Mail: sangadjieva@mail.ru стр. 514

Сафонов Денис Иванович, магистрант
ВГТУ, физико-технический
Влияние электронной подсистемы на внутреннее трение в титанате бария
Научный руководитель: Гриднев Станислав Александрович, д. ф.-м. н, Профессор, ВГТУ
Адрес: 394027 Воронеж, ул. Машиностроителей, 11-45
Телефон: (0732)74-11-07
E-Mail: densaf@yandex.ru стр. 268

Сенченко Алексей Владимирович
Томский политехнический университет, Химико-технологический
Удельная теплоемкость нанокристаллических тел
Адрес: 634034, Тосмк, ул. Вершинина-48б к. 611
Телефон: (3822)41-34-17
E-Mail: vicsachkov@mail2000.ru стр. 269

Сачков Виктор Иванович, аспирант
Томский политехнический университет, Химико-технологический
Селекция изотопов в условиях формирования границы раздела фаз
Адрес: 634034, Тосмк, ул. Вершинина-48б к. 611
E-Mail: vicsachkov@mail2000.ru стр. 272

Свеженцова Екатерина Витальевна, аспирант
Киевский Национальный Университет имени Тараса Шевченко, физический
Влияние модификации поверхности на фотолюминесцентные свойства нанопористого кремния
Адрес: 252139 Киев, ул. Курнатовского 4, кв.211
E-Mail: katt@univ.kiev.ua стр. 620

Сёмочкин Павел Сергеевич, 4 курс
Челябинский Государственный Педагогический Университет, физический
Стимулирование модификации ИК-спектров карбиноидов естественным излучением
Научный руководитель: Песин Леонид Абрамович, Профессор, доктор физико-математических наук, Заведующий кафедрой, профессор, Челябинский Государственный Педагогический Университет
Адрес: 454077 г.Челябинск, ул.Мамина, дом 23, кв 177
E-Mail: spavel1983@rambler.ru стр. 252

Сеник Кирилл Александрович, ассистент
Пермский госуниверситет, физический
Исследование релаксации внутренних напряжений композиционных материалов методом ЯКР при неизотропном воздействии
Научный руководитель: Ажеганов Александр Сергеевич, к. ф.-м. н, заведующий кафедрой, ПГУ кафедра экспериментальной физики
Адрес: 614000 Букерева 15 Пермский госуниверситет кафедра экспериментальной физики
E-Mail: senik@psu.ru стр. 274

Середин Павел Владимирович, аспирант
Воронежский государственный университет, физический
Характер закона Вегарда и сверхструктурная фаза в эпитаксиальных гетероструктурах Al_xGa_{1-x}As/GaAs(100)
Научный руководитель: Домашевская Эвелина Павловна, д. ф.-м. н, Профессор, заведующий кафедрой ФТТ ВГУ, Воронежский государственный университет
Адрес: г. Воронеж Университетская пл., д. 1, к. 26
Телефон: (0732) 78-93-63
E-Mail: paul@ftt.vsu.ru стр. 276

Сержантов Дмитрий Николаевич, 5 курс
Петрозаводский государственный университет, физико-технический
Электрополировка как метод проявления резиста на основе аморфного оксида ванадия
Научный руководитель: Величко Андрей Александрович, к. ф.-м. н, ст. преподаватель КЭИП, Петрозаводский государственный университет
Адрес: 185003, республика Карелия, Петрозаводск, ул. Лесная, д.5, кв.28
Телефон: (8142) 77-33-15
E-Mail: relax@karelia.ru стр. 1217

Силинин Антон Владимирович, аспирант
Кемеровский государственный университет, физический
Матрицы связи подрешеток кубической сингонии
Научный руководитель: Поплавной Анатолий Степанович, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой теоретической физики, Кемеровский государственный университет
Адрес: 650023, г. Кемерово, пр. Октябрьский, д. 69а, кв. 55
Телефон: (3842) 53-75-21
E-Mail: wanderer81@pisem.net стр. 96

Смирнов Андрей Алексеевич, 5 курс
ГОУ ВПО Уральский Государственный Технический Университет-УПИ, физико-технический
Экситоны и перенос энергии в кристаллах нелинейной оптики K₂Pb₂Cl₅ и RbPb₂Cl₅
Научный руководитель: Пустоваров Владимир Алексеевич, д. ф.-м. н, профессор, ГОУВПО Уральский Государственный Технический Университет-УПИ
Адрес: г. Екатеринбург, ул. Автомагистральная 23-65
Телефон: (3432)52-79-25
E-Mail: simpson13@bk.ru стр. 624

Сорокин Павел Борисович, 5 курс
Красноярский государственный университет, физический
Метод упрощения расчета электронной структуры нанотрубок
Научный руководитель: Фёдоров Александр Семёнович, к. ф.-м. н, с.н.с., Институт физики СО РАН им. Л.В.Киренского
Адрес: 660021 г. Красноярск, ул. Ленина, д. 126, кв. 12
Телефон: (8912)21-01-17
E-Mail: PSorokin@iph.krasn.ru стр. 277

Стерлюхин Андрей Александрович, аспирант
Тамбовский Государственный Университет им. Г.Р. Державина, Институт физики, математики и информатики при ТГУ
Кристаллизация аморфной фазы, полученной термоэлектрическим воздействием на поверхности LiF
Научный руководитель: Федоров Виктор Александрович, д. ф.-м. н, зав. кафедрой общей физики, Институт математики, физики и информатики при ТГУ
Адрес: 392622, Тамбов, ул. Интернациональная 33, кафедра общей физики
E-Mail: plushnik@mail.ru стр. 279

Суднищикова Илона Павловна, аспирант
БашГосУниверситет, химико-технологический
Оптические свойства и фотопроводимость в эпитаксиальных гетероструктурах кристаллов группы силленитов.

Научный руководитель: Чувывров Александр Николаевич, д. ф.-м. н, завкафедрой инженерной физики,
БашГосУниверситет

Адрес: 450059, г.Уфа, пр.Октября 23 - 44

E-Mail: olessya001@yandex.ru стр. 698

Таран Александр Григорьевич, магистрант
Воронежский государственный университет, физический

Эффекты пробоя р-п перехода в диодных и транзисторных структурах под действием сверхкоротких импульсов электромагнитного излучения

Научный руководитель: Терехов Владимир Андреевич, д. ф.-м. н, профессор, Воронежский государственный университет, физический, кафедра физики твёрдого тела

Адрес: 394006, Воронеж, Университетская пл.1, Воронежский государственный университет, физический

Телефон: (0732) 20-83-63

E-Mail: root@ftt.vsu.ru стр. 281

Тарасов Виктор Алексеевич, 5 курс
Кемеровский Государственный Университет, физический

Электронное строение и химическая связь хлората натрия

Научный руководитель: Журавлев Юрий Николаевич, к. ф.-м. н, доцент, Кемеровский Государственный Университет

Адрес: 650503 Кемеровский район п.Ясногорский д.15 кв. 10

E-Mail: apollo@ic.kemsu.ru стр. 282

Тихонов Никита Дмитриевич, 5 курс
ПетрГУ, Физики-технический

Фазовый переход в двуокиси марганца

Научный руководитель: Малиненко Владимир Пантелемонович, к. ф.-м. н, доцент, ПетрГУ, кафедра физики твердого тела

Адрес: 185640, Россия, г. Петрозаводск, пр. Ленина, д. 33, кб.247

Телефон: (8142)71-10-45

E-Mail: haos@onego.ru стр. 283

Требунских Сергей Юрьевич, аспирант
Воронежский государственный университет, физический

Влияние сверхкоротких импульсов электромагнитного излучения на характер переключения логических элементов

Научный руководитель: Терехов Владимир Андреевич, д. ф.-м. н, профессор, Воронежский государственный университет, физический, кафедра физики твёрдого тела

Адрес: 394006, г. Воронеж, Университетская пл.1, Воронежский государственный университет, физический

Телефон: (0732) 20-83-63

E-Mail: root@ftt.vsu.ru стр. 284

Устинов Алексей Михайлович, аспирант
Рязанский государственный педагогический университет, физико-математический

Особенности анализа биений осцилляций Шубникова - де Гааза

Научный руководитель: В. И. Кадушкин, д. ф.-м. н, профессор, РязГПУ

Адрес: 390000, Рязань, ул. Свободы 46

E-Mail: julik@rspu.ryazan.ru стр. 287

Устинов Алексей Михайлович, аспирант
Рязанский государственный педагогический университет, физико-математический

Времена одночастичной релаксации в гетеросистеме AlGaAs/GaAs

Научный руководитель: В. И. Кадушкин, д. ф.-м. н, профессор, РязГПУ
Адрес: 390000, Рязань, ул. 46
E-Mail: julik@rspu.ryazan.ru стр. 285

Ушаков Иван Владимирович, аспирант
Тамбовский Государственный Университет им. Г.Р. Державина, Институт физики, математики и информатики при ТГУ
Исследование деформирования и разрушения композиционного соединения полимерного основания с металлическим покрытием на основе экспериментального моделирования
Научный руководитель: Федоров Виктор Александрович, д. ф.-м. н, зав. кафедрой общей физики, Институт математики, физики и информатики при ТГУ
Адрес: 392622, Тамбов, ул. Интернациональная 33, кафедра общей физики
E-Mail: plushnik@mail.ru стр. 1232

Федоров Игорь Александрович, 5 курс
Кемеровский Государственный Университет, физический
Электронное строение карбонатов щелочных металлов
Научный руководитель: Журавлев Юрий Николаевич, к. ф.-м. н, доцент, Кемеровский Государственный Университет
Адрес: 630099 г. Кемерово пр. Ленина 55Б-259
E-Mail: f992fia@ic.kemsu.ru стр. 289

Филиппова Лилия Владимировна, 5 курс
Дальневосточный государственный университет, Институт физики и информационных технологий, физико-технический
Диффузия поверхностной фазы Si(111) 4x1-In с учётом ориентации вицинальной подложки
Научный руководитель: Гаврилюк Юрий Леонидович, д. ф.-м. н, , ИАПУ ДВО РАН
Адрес: 690090г. Владивосток, ул. Пограничная, 26
Телефон: (4232) 31-06-96
E-Mail: philippl@iacp.dvo.ru стр. 291

Хайруллина Наталия Ароновна, ассистент
Челябинский Государственный Педагогический Университет, физический
Модификация ИК- и ЭПР-спектров при старении карбиноидов
Научный руководитель: Песин Леонид Абрамович, д. ф.-м. н, профессор, Челябинский Государственный Педагогический Университет
Адрес: г. Челябинск пр. Ленина 69 454080
Телефон: (3512) 65-09-24
E-Mail: po_nadu@cspi.urg.ac.ru стр. 292

Хоник Светлана Витальевна, 5 курс
Воронежский госуниверситет, физический
Исследование порогового поля процессов переполяризации дефектных кристаллов группы ТГС
Научный руководитель: Дрождин Сергей Николаевич, д. ф.-м. н, профессор, Воронежский госуниверситет
Адрес: 394053 Воронеж, ул. Лизюкова д.44 кв. 86
E-Mail: skhonik@mail.ru стр. 294

Чан Ногк тхи Бить, магистрант
Ростовский государственный университет, физический
Температурно- частотные исследования диэлектрической проницаемости кристаллов ниобата натрия.
Научный руководитель: Сидоренко Е. Н., к. ф.-м. н, доцент, РГУ
Адрес: 344091 Ростов- на- Дону, Пр. Стачки 217/3 , кв. 21
E-Mail: tt@phys.rsu.ru стр. 296

Чемеркина Маргарита Викторовна, аспирант
Тамбовский Государственный Университет им. Г.Р. Державина, Институт математики, физики и информатики

Изучение процессов зарождения и залечивания микротрещин при двойниковании кристаллов кальция

Научный руководитель: Федоров Виктор Александрович, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой общей физики, Тамбовский государственный университет им. Г.Р. Державина
Адрес: 392622, Тамбов, ул. Интернациональная 33, ТГУ, кафедра общей физики.
Телефон: (0752) 35-26-14
E-Mail: feodorov@tsu.tmb.ru стр. 1253

Черемисин Александр Борисович, 5 курс
Петрозаводский Государственный Университет, физико-технический
Электрические свойства планарной структуры на основе V2O5 - геля.

Научный руководитель: Величко Андрей Александрович, к. ф.-м. н, ст. преподаватель КЭИП, Петрозаводский Государственный Университет
Адрес: 185003, республика Карелия, Петрозаводск, пр.Комсомольский, д.2, кв.67
E-Mail: alexiii1982@mail.ru стр. 297

Черемисина Варвара Геннадьевна, 5 курс
Кемеровский Государственный Университет, физический

Формирование центров чувствительности и их роль в образовании металлического серебра на поверхности микрокристаллов AgBr

Научный руководитель: Созинов Сергей Анатольевич, Старший преподаватель, Зав. лаборатории электронной микроскопии, Кемеровский Государственный Университет
Адрес: 650043, г.Кемерово, ул.Красная 6
E-Mail: tania@phys.kemsu.ru стр. 299

Чувенкова Ольга Александровна, магистрант
Воронежский государственный университет, физический

Получение и свойства тонких плёнок окислов олова

Научный руководитель: Домашевская Эвелина Павловна, д. ф.-м. н, профессор, зав. кафедрой, Воронежский государственный университет, физический, кафедра физики твёрдого тела
Адрес: 394006, Воронеж, Университетская пл.1, Воронежский государственный университет, физический, кафедра физики твёрдого тела
Телефон: (0732) 20-83-63
E-Mail: root@ftt.vsu.ru стр. 300

Чудинов Александр Андреевич, 6 курс
Уральский государственный технический университет, физико-технический

Люминесценция наноструктурного диоксида кремния при возбуждении синхротронным излучением

Научный руководитель: Зацепин Анатолий Федорович, к.т.н., доцент, Уральский государственный технический университет
Адрес: 620098, Россия, Екатеринбург, ул. Ильича, д.-71, корп.-Г, кв.-5
E-Mail: alekc2k@mail.ru стр. 640

Шиляев Павел Анатольевич, м. н. с.
Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского, физический

Система параметров для характеристики поверхностной геометрии твердых тел

Научный руководитель: Павлов Дмитрий Алексеевич, д. ф.-м. н, заведующий кафедрой, физический
Адрес: 603950, г.Нижний Новгород, пр.Гагарина, 23/3-334
Телефон: (8312) 65-64-75
E-Mail: shilyaev@phys.unn.ru стр. 302

Шлыгин Евгений Сергеевич, аспирант
ГОУ ВПО Уральский государственный технический университет - УПИ, физико-технический

Люминесценция центров Cr³⁺ при возбуждении в области края фундаментального поглощения в сложных бериллийсодержащих кристаллах

Научный руководитель: А.В.Кружалов, д. ф.-м. н, зав. кафедрой, профессор, ГОУ ВПО Уральский государственный технический университет - УПИ

Адрес: 620002 Екатеринбург, Мира 19

E-Mail: shlygin@dpt.ustu.ru стр. 644

Шориков Алексей Олегович, инженер

ИФМ УрО РАН, лаборатория оптики металлов

Расщепление t_{2g} - уровня d-оболочки Co в Na_xCoO₂, Na_xCoO₂*4x(D₂O)

Научный руководитель: Анисимов В.И., д. ф.-м. н, зав.лаб., ИФМ УрО РАН

Адрес: 620219 г. Екатеринбург, ул С.Ковалевской 18 ГСП-170

E-Mail: shorikov@optics.imp.uran.ru стр. 304

Шулгунова Ирина Сергеевна, магистрант

СПбГЭТУ, электроники

Анализ уширенных спектров проводимости самоорганизующихся квантовых точек.

Научный руководитель: Зубков Василий Иванович, к. ф.-м. н, доцент кафедры микроэлектроники, СПбГЭТУ

Адрес: 197110 ул. Большая Зеленина, д. 20, кв. 26, Санкт-Петербург

E-Mail: shulgun@mail.ru стр. 306

Юнак Мария Александровна, 3 курс

Тамбовский государственный университет им. Г. Р. Державина, Институт математики, физики, информатики

Влияние скорости относительной деформации на объем материала вытесненного в навал и уплотнении под индентором при динамическом индетировании

Научный руководитель: Тюрин Александр Иванович, к. ф.-м. н, доцент, ТГУ

Адрес: 392622 Тамбов ул. Интернациональная 33

E-Mail: tyurin@tmb.tsu.ru стр. 307

Яцына Николай Александрович, аспирант

Кемеровский государственный университет, физический

Адсорбция азото-серосодержащих гетероциклических соединений на поверхности микрокристаллов бромида серебра.

Научный руководитель: Юдин Андрей Леонидович, ст. преподаватель кафедры экспериментальной физики, Кемеровский государственный университет

Адрес: 650043 г. Кемерово ул. Красная 6

Телефон: (3842) 58-31-95

E-Mail: f982yna@ngs.ru стр. 309

Определение структуры координационного окружения атомов переходных металлов в аморфных соединениях с помощью околопороговой структуры рентгеновских спектров поглощения

Авакян Леон Александрович

Ростовский государственный университет

Бугаев Лусеген Арменакович, д. ф.-м. н

Lavakyan@Rambler.ru

Fe-O расстояние – R_l и число ближайших соседей атомов кислорода – N_l , координирующих железо в Fe(II)- и Fe(III)-содержащих силикатных стёклах, определяются с помощью метода, основанного на Фурье-трансформационном анализе спектров XANES, выполненного для короткого k-интервала ($\Delta k \sim 1.5 - 3.0 \text{ E}^{-1}$), и последующей подгонке, выделенного таким образом, Фурье пика первой координационной сферы. Амплитуды рассеяния для Fe-O пар, используемые для подгонки, рассчитаны с помощью Хартри-Фоковского МТ-потенциала с использованием нейтральных электронных конфигураций рассеивающих атомов Fe($1s^1 2s^2 \dots 3d^7 4s^2$) и O($1s^2 2s^2 2p^4$).

Обоснованность применения такой модели к различным состояниям окисления атома железа в стеклах, а также точность определения параметров R_l и N_l анализируется в ходе применения разрабатываемого метода к Fe-XANES спектра модельных соединений – Fe(II) и Fe(III) водных сульфатных растворов. Моделирование вклада ближайших к железу атомов кислорода в Fe-XANES спектрах ряда стекол, в которых железо одновременно присутствует в Fe(II) и Fe(III) состояниях, выполнено с помощью односферной и последующей двухсферной подгонке.

Такая схема анализа позволила получить структурные параметры для кислородных полиэдров вокруг Fe^{2+} и Fe^{3+} атомов, а также позволила оценить величину отношения концентраций $\text{Fe}^{2+} / \text{Fe}^{3+}$, изменяющуюся вдоль исследуемого ряда стекол.

Влияние размера зерен на фазовый переход металл-полупроводник в тонких поликристаллических пленках диоксида ванадия.

¹*Алиев Расул Абдурахманович*

²*Тюнникова Наталья Валериевна*

Климов Владимир Александрович

¹*Институт Физики им. Х.И. Амирханова, ДНЦ РАН, г. Махачкала.*

²*Ботанический институт им. В.Л. Комарова РАН, г. Санкт-Петербург.*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург.

Шадрин Евгений Борисович, д.ф.-м.н

Sheyh@rambler.ru

Фазовый переход в диоксиде ванадия (VO_2) наблюдается при 67°C и сопровождается резким изменением оптических свойств и электропроводности. Скачок проводимости достигает пяти порядков величины. При охлаждении ниже 67°C тетрагональный VO_2 испытывает, предположительно, мартенситный переход в менее симметричную моноклинную фазу, обладающую полупроводниковыми свойствами (ширина запрещенной зоны $\sim 0.7 \text{ эВ}$) [1]. Фазовый переход сопровождается возникновением заметных упругих напряжений, которые из-за малой пластичности перехода приводят к разрушению монокристаллов. По этой причине

значительная доля исследований и большинство практических применений диоксида ванадия связано именно с тонкими пленками, которые не разрушаются при неограниченном циклировании вблизи температуры фазового перехода.

Форма петли гистерезиса физических свойств для пленок диоксида ванадия заметно отличается от характерной для монокристаллов. Она имеет большую протяженность по температуре и, как правило, большую ширину. Это связано с тем, что поликристаллическая пленка построена из зерен, имеющих различные размеры и различную степень нестехиометричности по кислороду. Распределение зерен по размерам и по степени отклонения от стехиометрии и определяют форму петли.[2]

Для различных практических приложений желательно иметь пленки VO_2 с петлей

гистерезиса различной формы. Так для оптических лимитеров предпочтительна узкая и протяженная петля, а для пленок, предназначенных для записи оптической информации, петля должна быть широкой и по форме приближаться к прямоугольной.

Петли, исследованные в данной работе, были получены методом лазерного напыления из металлических мишеней. Толщина пленок составляла $\sim 800\text{\AA}$. Варьируя условия синтеза (температуру подложки, давления кислорода и др.), можно получать пленки с различными петлями гистерезиса. Так ширина петли может меняться от

1 до 40°C . [3]

Данная работа посвящена исследованию возможностей корректировать формы петли гистерезиса уже синтезированных пленок VO_2 . Ширина петли гистерезиса определяется в первую очередь размерами кристаллических зерен, слагающих пленку. Согласно[4] ширина петли гистерезиса отдельного зерна обратно пропорциональна \sqrt{r} , где r -размер зерна. Таким образом, для того, чтобы увеличить ширину петли (это важно при использовании пленок для записи оптической информации), требуется уменьшить размер зерен.

Одним из таких способов может быть доокисление пленки путем быстрого нагрева ее до высокой температуры при атмосферном давлении и последующего резкого охлаждения.

Результаты отжига при 460°C представлены на (рис.1) (на рисунках G-доля металлической фазы в пленке). По мере окисления пленки размеры областей, занятых в зернах диоксидом ванадия сокращаются за счет образования предельного окисла V_2O_5 . Уменьшение размера и приводит к уширению петли.

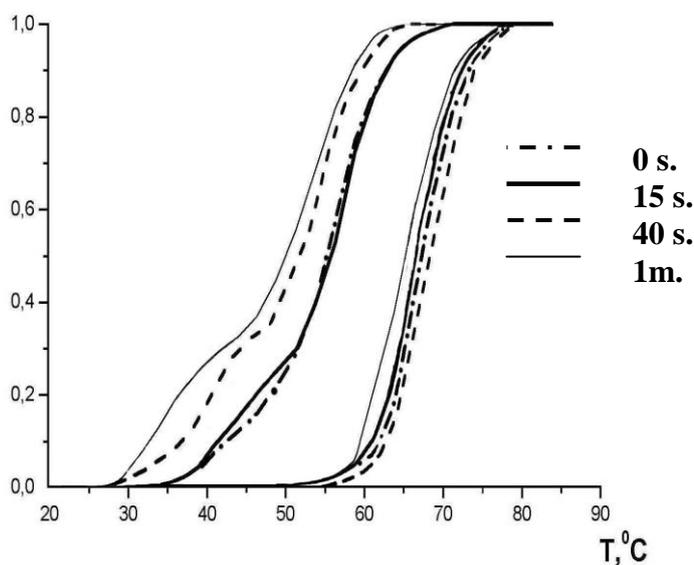


рис.1

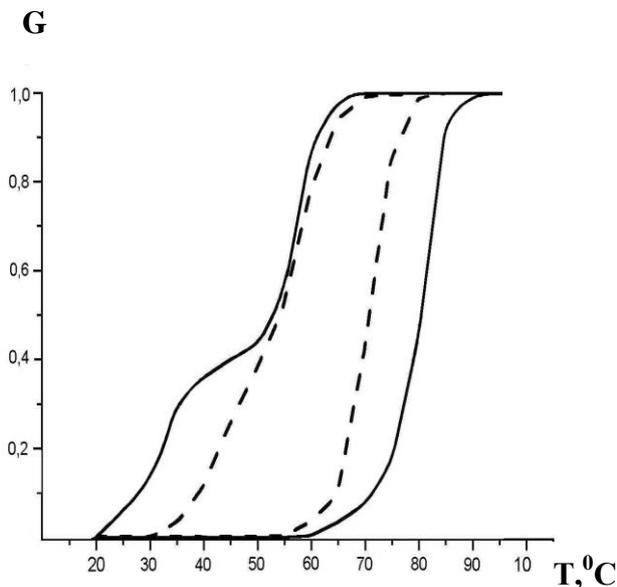


рис.2

Другая возможность уменьшения размера зерен заключается в растворении пленок VO_2 в подходящем растворителе. Нами был выбран 0.5N HNO_3 , в котором при 16°C наблюдалось неизбирательное травление пленки диоксида ванадия. Из (рис.2) видно, что в полном соответствии с вышесказанным и здесь уменьшение толщины пленки сопровождается уширением петли гистерезиса.

Список публикаций:

- [1]. Бугаев А.А., Захарченя Б.П., Чудновский Ф.А.. Фазовый переход металл-полупроводник и его применение. Наука, Л. 183. (1979).
 [2] Т.Г.Ланская, И.А.Меркулов, Ф.А.Чудновский. ФТТ. 20,1201.(1978)
 [3]. Алиев Р.А., Климов В.А. ФТТ,46,3.515-519,(2004).
 [4]. Хахаев И.А., Чудновский Ф.А., Шадрин Е.Б. ФТТ, 36, 6, 1643.(1994).

Исследование электрофизических свойств теллурида меди

Асылгужина Гульфия Назыргалеевна

Усманов Радмир Харисович, Рафиков Ильмир Минефаритович

Стерлитамакский государственный педагогический институт

Биккулова Нурия Нагимьяновна, к.ф.-м.н

gul75@mail.ru

Исследование процессов, происходящих вблизи и в областях фазовых превращений, является одним из развивающихся направлений физики твердого тела.

Скачкообразное изменение электрических и тепловых свойств, происходящих при фазовом переходе, часто используется для создания различного рода преобразователей. Для этого необходимо иметь достоверные данные о величине и закономерностях изменения исследуемого эффекта при фазовых переходах, о температурном интервале перехода, о влиянии на них примесей, отклонений от стехиометрии и других внешних воздействий. Совокупность таких данных может выявить пути к стабилизации и управлению явлениями при фазовом переходе.

В связи с этим, в данной работе было проведено исследование электропроводности, термо-эдс твердого раствора $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Te}$ от степени нестехиометричности δ и температуры в области фазовых переходов.

Измерения электропроводности σ и коэффициента электронной термо-эдс велись в области температур от 25⁰С до 640⁰С. В качестве электронных потенциальных зондов использованы хромелевые ветви термопар. Термоэлектрические измерения проводили при градиенте температуры вдоль образца порядка 10⁰С/см.

Все измерения выполнялись в слабом потоке сухого очищенного аргона. Погрешность измерений σ находилась в пределах 4-7 %, коэффициент термо-эдс - в пределах 2-3 %.

Получены температурные зависимости термо-эдс $\alpha(T)$ и электропроводности $\sigma(T)$ соединения $Cu_{2-\delta}Te$ от степени нестехиометричности δ ($0 \leq \delta \leq 0,02$).

Установлено, что при температуре около 600⁰С на температурной зависимости электропроводности наблюдается аномалия, связанная с фазовым переходом в кубическую суперионную фазу. При отклонении от стехиометрии температура фазового перехода смещается в сторону больших температур. Отмечены небольшие изменения на кривой $\sigma(T)$ при температурах около 305⁰С и 633⁰С, что связано с фазовыми переходами без изменения типа решетки. Аналогичная картина наблюдается и на температурной зависимости термо-эдс составов $Cu_{2-\delta}Te$ ($0 \leq \delta \leq 0,02$).

Согласно работе [1], в теллуриде меди $Cu_{2-\delta}Te$ наблюдаются фазовые переходы при температурах 305⁰С, 360⁰С, 555⁰С. Наши данные по электропроводности подтверждают наличие этих фазовых переходов.

Список публикаций:

[1] Yakhibaev R.A., Mukhamadeeva H.H., Almukhametov R.F. *Phase Transformations and Ionic Transport in the $Cu_{2-\delta}Te$ Superionic Conductor // Phys. Stat. Sol. 1988. Vol.103 (a), H.1. P.135-141.*

Уточнение структуры полупроводникового соединения Cd_3As_2

Афанасьев Михаил Михайлович

Воронежский Государственный Университет

Алейникова Ксения Борисовна

mike@phys.vsu.ru

Цель настоящей работы состояла в уточнении структуры соединения Cd_3As_2 . Как известно, структура Cd_3As_2 была определена ранее в нескольких пространственных группах ($I4_1/acd$, $P4_2/nmc$). Наименьший R-фактор (14,6%) был получен G. A. Steigmann and J. Goodyear (Acta Cryst. (1968), В. 24, 1062), которые расшифровали структуру в пространственной группе $I4_1cd$. Но массив отражений был получен фотометодом и R-фактор был достаточно велик. Поэтому были необходимы новые прецизионные исследования.

Рентгендифракционный эксперимент был проведен в ЦРСИ ИНЭОС РАН (г. Москва) на автоматическом дифрактометре "Siemens" (Mo K_{α} -излучение, графитовый монохроматор). Определение и уточнение структуры выполняли с помощью программного комплекса SHELXTL.

Кристалл имеет тетрагональную решетку (пространственная группа $I4_1cd$, $a=b=12,67$ Е., $c=25,48$ Е). Так как структура не centrosymmetric расшифровку производили с использованием функции Паттерсона. Были определены 6 независимых атомов кадмия и 5 независимых атомов мышьяка. Атомы кадмия находятся в эквивалентных 16b позициях, в то время как атомы мышьяка строят гцк решетку (2 из них находятся в 8-кратных (8a) позициях (As(1) и As(2)), а остальные 3 - в 16-кратных (16b) (As(3), As(4) и As(5))). Фактически элементарная ячейка Cd_3As_2 содержит 16 гцк элементарных кубиков, построенных атомами

мышьяка, 3/4 тетраэдрических пустот которых заполнены атомами кадмия (Passerini L., Gazzetta Chimica Italia (1928), 58, 655-664).

После уточнения R-фактор составил 7,61% по 917 независимым ненулевым отражениям с $F_0 > 4\sigma F_0$. Причем позиции атомов, относительно определенных G. A. Steigmann and J. Goodyear, сдвинулись незначительно, хотя R-фактор снизился вдвое. Соответственно длины связей и валентные углы также изменились незначительно. Длины связей полученной структуры представлены в таблице (так как связи As-As нет, то представлены только связи атомов Cd с атомами As).

Cd(1)-As(2)	2.8886 E	Cd(2)-As(2)	2.6964 E	Cd(3)-As(1)	2.6982 E
Cd(1)-As(3)	2.9505 E	Cd(2)-As(3)	2.6590 E	Cd(3)-As(3)	2.6558 E
Cd(1)-As(4)	2.5914 E	Cd(2)-As(4)	2.9596 E	Cd(3)-As(4)	2.6639 E
Cd(1)-As(5)	2.6271 E	Cd(2)-As(5)	2.6481 E	Cd(3)-As(5)	3.0544 E
Cd(4)-As(2)	2.6816 E	Cd(5)-As(1)	2.8498 E	Cd(6)-As(1)	2.6922 E
Cd(4)-As(3)	2.6471 E	Cd(5)-As(3)	2.6663 E	Cd(6)-As(3)	3.0397 E
Cd(4)-As(4)	2.6670 E	Cd(5)-As(4)	2.9664 E	Cd(6)-As(4)	2.6384 E
Cd(4)-As(5)	3.0524 E	Cd(5)-As(5)	2.5552 E	Cd(6)-As(5)	2.6070 E

Управление электрофизическими свойствами сегнетокерамики типа ЦТС

Балин Михаил Андреевич

Пензенский Государственный Университет

Аверин Игорь Александрович, к.ф-м.н

micro@diamond.stup.ac.ru

Актуальность данной темы обусловлена интенсивным использованием твердых растворов на основе сегнетокерамики типа ЦТС ($\text{Pb}(\text{Zr}_x\text{Ti}_{1-x})\text{O}_3$) в области микроэлектроники. За счет изменения состава одного из элементов твердого раствора, можно управлять свойствами всего материала в целом. В данной работе исследованы электрофизические свойства, химический состав сегнетокерамики типа ЦТС, полученной по единой технологии. Качественный и количественный анализ состава сегнетокерамики осуществлялся при помощи рентгеновского флюоресцентного анализатора ФРА-20 Р. Из анализа экспериментальных данных следует, что количественный состав сегнетокерамических образцов отличается содержанием таких элементов, как Ti, Zr, Pb, Bi, O. В качестве примера представлена характерная для таких элементов, как Ti, Zr, Bi зависимость электропроводности от их содержания в исследуемых образцах (рис. 1). В аналитическом виде данная зависимость, описываемая уравнением (1), имеет параболический характер

$$\lg(\sigma) = a + b(x_i - k)^2 \quad (1)$$

где a , b , k - эмпирические коэффициенты, σ электропроводность, x_i - содержание соответствующего элемента в сегнетокерамике.

$\lg(\sigma) (\text{Ом}\cdot\text{м})^{-1}$	x_{Ti} (отн.ед.)	x_{Zr} (отн.ед.)	x_{Bi} (отн.ед.)
---	---------------------------	---------------------------	---------------------------

-10.2	2085	1644	130
-10.55	1754	2422	86
-10.9	2189	2265	124

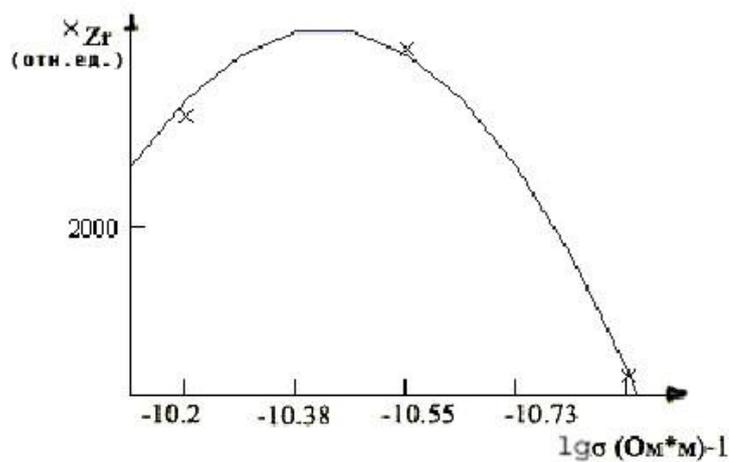


рис. 1

Зависимость электропроводности от содержания кислорода в сегнетокерамике имеет экспоненциальный характер и описывается уравнением (2),

$$\lg(\sigma) = a + b \cdot \exp(k - x_i)^2 \quad (2)$$

где $a=193$, $b=0.9$, $k=0.9$.

Влияние концентрации свинца в сегнетокерамике на ее электропроводность (рис.2), носит линейный характер и описывается уравнением (3),

$$\lg(\sigma) = a + bx_i \quad (3),$$

где $a=-11.238$, $b=1.6 \cdot 10^{-3}$.

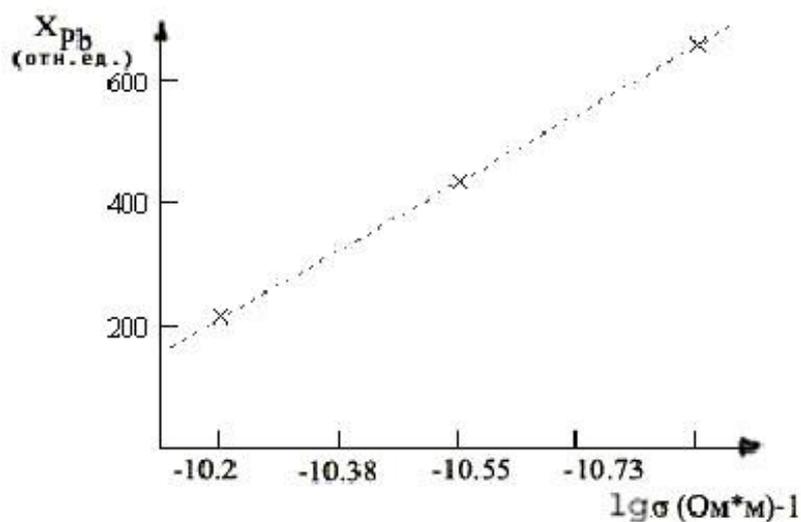


рис. 2

Таким образом, установлена корреляция между концентрацией химических элементов, входящих в состав сегнетокерамических образцов типа ЦТС, полученных по единой технологии, и их электрическими свойствами.

Моделирование атомной структуры тонких аморфных пленок нормальных фосфидов цинка и кадмия

Батищева Светлана Николаевна

Зинченко Елена Николаевна

Воронежский Государственный Университет

Алейникова Ксения Борисовна, к.ф.-м.н

zinchenko@phys.vsu.ru

Анализируется атомная структура тонких аморфных пленок Zn_3P_2 и Cd_3P_2 , полученных взрывным лазерным распылением исходных монокристаллов в вакууме не ниже 10^{-4} Па. Использовался импульсный лазер ГОС-301, длина волны 1,06 мкм, энергия излучения в режиме свободной генерации 160 Дж, длительность импульса 0,8 мс, плотность мощности излучения для данных материалов составляет в среднем $2 \cdot 10^5$ Вт/см². Пленки осаждались из газовой фазы на свежие сколы кристаллов $NaCl$, отделялись от подложки в дистиллированной воде. Толщина пленок регулировалась расстоянием подложка – исходный монокристалл.

Кривые рассеяния быстрых электронов получены на электронографе ЭМР-100А на просвет в режиме непрерывной записи и пошаговой регистрации, с введением противопололя и без него, при ускоряющем напряжении 50 кВ и 75 кВ. Обработка кривых интенсивности рассеянных электронов проводилась по методу Набитовича-Стецова, позволяющему исключить некогерентное рассеяние и рассеяние несвязанными атомами вне зависимости от его происхождения. Моделирование функций радиального распределения атомов (ФРРА) проводилось согласно модернизированному методу функций пар атомов, позволяющему оценить парциальный вклад межатомных расстояний каждого типа в модельную ФРРА.

Для Cd_3P_2 приведены экспериментальная ФРРА и модельная ФРРА, при расчете которой рассеивающие способности атомов Cd и P учитывались по методу Ванштейна (рис. 1).

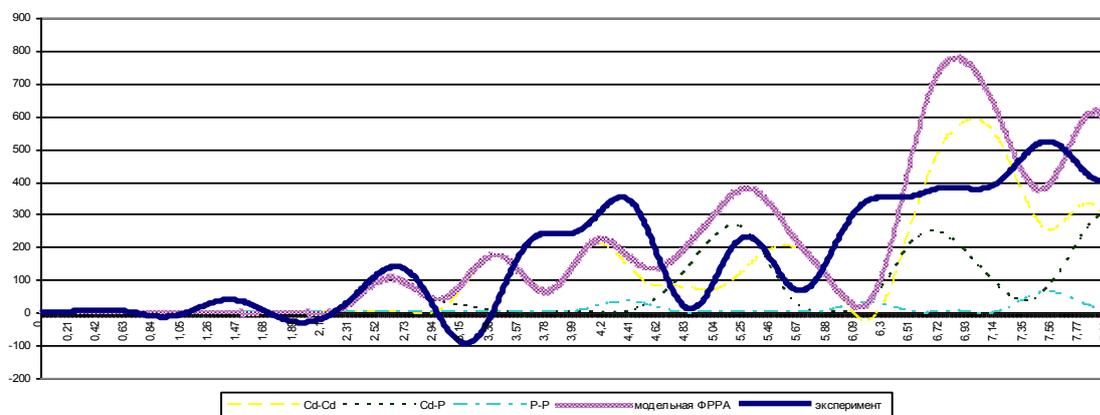


рис. 1

Первый максимум экспериментальной и модельной ФРРА совпадает и представляет собой межатомное расстояние атомов $Cd \leftrightarrow P$, соответствующее расстоянию в кристаллическом Cd_3P_2 . Кристаллическая структура Cd_3P_2 - кубическая плотная упаковка P , три четверти тетраэдрических пустот которой заполняют атомы Cd , поэтому второй максимум соответствует межатомному расстоянию атомов $Cd \leftrightarrow Cd$, находящихся в соседних тетраэдрических пустотах, а третий - межатомному расстоянию атомов $Cd \leftrightarrow Cd$, находящихся в тетраэдрических пустотах, заполненных по алмазному принципу. В тонкой аморфной пленке расстояния между атомами, находящимися в соседних тетраэдрических пустотах, удлиняются.

Дальнейший анализ показал, что максимумы экспериментальной ФРРА в большинстве своем соответствуют межатомным расстояниям $P \leftrightarrow P$.

Соединения Cd_3P_2 , Zn_3P_2 образованы по правилам нормальной валентности, т.е. P приобретает отрицательный заряд, а атом металла – положительный, следовательно, атом P должен иметь аномальную рассеивающую способность для электронов, поэтому был проведен расчет модельных ФРРА с увеличенной рассеивающей способностью атомов P и уменьшенной рассеивающей способностью атомов металлов.

Для Cd_3P_2 приведены экспериментальная ФРРА и модельная ФРРА, рассчитанная с увеличенной рассеивающей способностью атомов P и уменьшенной рассеивающей способностью атомов Cd (рис. 2).

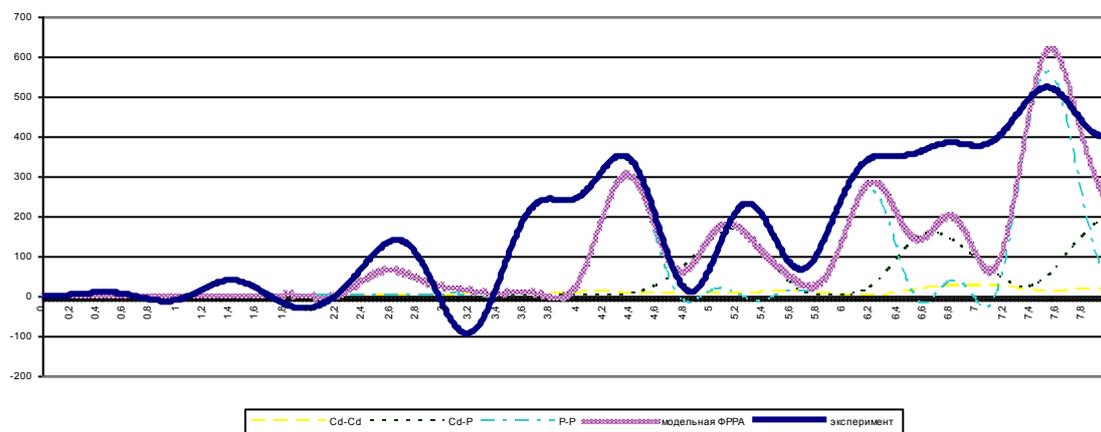


рис. 2

Полученные модельные ФРРА находятся в лучшем соответствии с экспериментом, что подтверждает предположение об аномальной рассеивающей способности атомов P для электронов в тонких аморфных пленках Zn_3P_2 и Cd_3P_2 .

Пластическая деформация в модели возбужденных атомов

Бимбаев Даши Дамдинцыренович

Лоншаков Дмитрий Олегович

Бурятский Государственный Университет

Баинова Альбина Борисовна

abain76@list.ru

В последние годы развито представление о том, что пластическая деформация стеклообразных твердых тел обусловлена появлением под действием механических напряжений неких структурных дефектов в виде элементарных сдвигов.

В нашей модели пластической деформации роль такого сдвига выполняет процесс критического смещения возбужденного атома. Образование возбужденного атома связано с предельным смещением кинетической единицы, соответствующим максимуму силы межатомного взаимодействия. Макроскопическая пластическая деформация складывается из таких локальных микроскопических элементарных сдвигов.

Такой подход приводит к следующему приближенному уравнению пластической деформации:

$$\varepsilon_B = \frac{\ln(1/f_g)}{9} \frac{1}{\gamma_L}, \quad (1)$$

где γ_L - решеточный параметр Грюнайзена. В щелочносиликатных стеклах γ_L выражает ангармонизм колебаний ионной подрешетки, образованной ионами щелочных металлов и немостиковыми ионами кислорода.

Доля флуктуационного объема f_g при температуре стеклования слабо зависит природы стекол и входит в данное уравнение под логарифмом, поэтому пластическая деформация обратно пропорциональна параметру Грюнайзена:

$$\varepsilon_B = \frac{C}{\gamma_L}, \quad (2)$$

где коэффициент пропорциональности C является практически постоянной величиной:

$$C = \frac{1}{9} \ln\left(\frac{1}{f_g}\right) \cong \text{const} \cong 0.4, \quad (3)$$

Величину γ_L можно вычислить по данным о коэффициенте Пуассона μ и f_g :

$$\gamma_L = A \left(\frac{1+\mu}{1-2\mu} \right) \approx 0,8 \left(\frac{1+\mu}{1-2\mu} \right), \quad (4)$$

где коэффициент $A = \left(\frac{2}{9} \ln\left(\frac{1}{f_g}\right) \right)$ близок к единице; например, при «универсальном» значении $f_g = 0,025$ имеем $A = 0,82$.

Зная γ_L , по уравнению (1) можно рассчитать пластическую деформацию ε_B . Мы сравнили вычисленные и экспериментальные значения пластической деформации 15 жесткоцепных стеклообразных полимеров (см. рис.1).

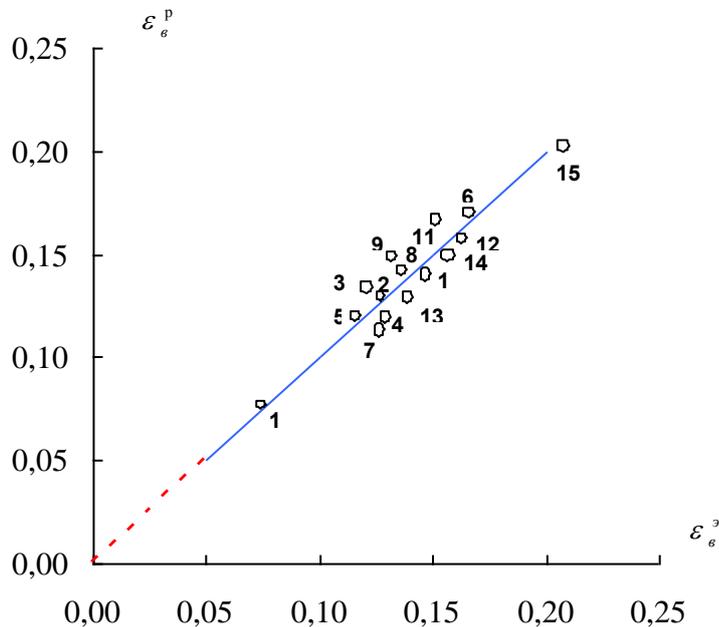


рис.1

Как видно, наблюдается вполне удовлетворительное согласие между расчетом и опытом.

Таким образом, модель возбужденных атомов приводит к уравнению пластической деформации стеклообразных твердых тел, которое находится в удовлетворительном согласии с экспериментом для аморфных полимеров.

Роль примеси в процессе кристаллизации дендритных кристаллов

Блинов Олег Александрович

Челябинский Государственный Педагогический Университет

Брызгалов Александр Николаевич, д-р ф-м. н.

blinova@74.ru

Механизм образования дендритов и стабильность внешней формы многих из них до настоящего времени не изучен. С целью определения механизма формирования дендритов и установления возможностей управления этим процессом я провел исследования на воднорастворимых кристаллах хлористого аммония (NH_4Cl), используя их в качестве модельных.

Кристаллы хлористого аммония (NH_4Cl) имеют фрактальную структуру, а плотность убывает с увеличением радиуса по закону:

$$\rho(r) \sim R_0^{-D} r^{D-E}, \quad (1)$$

где $\rho(r)$ – плотность заполнения кластера, R_0 – радиус, r – радиус кластера, E – евклидова размерность пространства, D – фрактальная размерность кластера (причем $D \leq E$).

Фрактальная размерность является количественной мерой структурности фрактала, то есть служит характеристикой того, как кластер занимает предоставленное ему пространство. Нетрудно видеть, что при $D = E$, $\rho = \text{const}$. Фрактальная размерность кластера изменялась с изменением концентрации примеси. Расчет фрактальной размерности выполнен клеточным методом на РС с помощью моей программы. В своей работе я попытался дать объяснение наблюдаемым фактам.

Для выяснения механизма действия примеси нами использовались образцы раствора NH_4Cl , к которому добавлялась примесь. Для работы использовался металлографический микроскоп МИМ-8 с поляризационной приставкой.

Первоначально в качестве примеси был выбран карбамид ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2$) (выбор примеси был связан с тем, что данное вещество способно образовывать комплексы с кристаллообразующим веществом), но затем использовался медный купорос. Это было сделано для выяснения распределения примеси вокруг растущего дендрита, т.к. он обладает двулучепреломлением, а также тем, что при его диссоциации в растворе он не дает родственных ионов с основным веществом, что имеет место в случае с карбамидом. Поэтому можно наблюдать за распределением примеси вокруг растущего кристалла под микроскопом в поляризованном свете.

Ионы примеси и основного материала образуют комплексы вида $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$ в присутствии отдельных ионов $[\text{NH}_4]^+$, H^+ , OH^- , $[\text{SO}_4]^{2-}$, Cl^- . Комплекс представляет собой структурное образование с ионами Cu^{2+} в центре. С приближением к поверхности кристалла под действием кристаллического поля происходит вытеснение иона из центра комплекса и образуется полуоктаэдр. При приближении комплекса происходит дегидратация поверхности, с нее удаляются гидроксильные группы OH^- , затем из комплекса выделяется ион меди, образуются приповерхностные комплексы $[\text{NH}_4]^+$, место меди занимает ион хлора. Образуется приповерхностный слой, который экранирован молекулами воды. При этом изменяется взаимодействие между ионами, связь приобретает электростатический характер. Ионы меди частично удаляются в раствор, а часть Cu^{2+} осаждается на поверхности кристалла.

Присоединение комплексов происходит в направлении объемных диагоналей куба, угол между которыми составляет $\sim 71^\circ$ (рис. 1). В отсутствие примесей реализуются другие направления, угол между которыми составляет $\sim 89^\circ$.

Присутствие разных углов в составе дендрита объясняется тем, что при разных концентрациях примеси реализуются разные направления и механизмы роста. При отсутствии примеси рост идет в плоскости $\{100\}$. Примесь экранирует эти направления, и тогда рост протекает вдоль объемных диагоналей кубической решетки (направления сильных связей) NH_4Cl . При дальнейшем увеличении концентрации происходит экранирование диагональных направлений, что дает возможность застраиваться граням. При этом дендритный рост сменяется вершинным и скелетным, а в дальнейшем образуются кристаллы овальной формы с элементами граней.

Дендрит является формой роста кристалла. Формирование дендрита не подчиняется законам классической термодинамики, но с их помощью легко объясняется послеростовой распад дендрита.

Результаты исследования сводятся к следующему:

-Отчетливо просматривается дендритный рост кристаллов NH_4Cl без примеси. Имеются ветви первого и высших порядков с углами между ними $\sim 89^\circ$. Видна периодическая субструктура ветвей первого порядка.

-Введение примеси уже при концентрации $\sim 0,08 \text{ г/см}^3$ приводит к изменению угла между ветвями дендрита, что указывает на изменение механизма роста. При дальнейшем увеличении концентрации примеси возрастает плотность ветвей в кристалле.

-При достижении концентрации примеси $\sim 0,1 \text{ г/см}^3$ появляются отдельные кристаллики хлорида аммония, покрытые хорошо наблюдаемой в поляризованном свете примесью. Без примеси отдельных кристалликов получить практически не удается.

-Существует предельная концентрация примеси ($\sim 0,08 \text{ г/см}^3$), при достижении которой угол между ветвями составляет $\sim 71^\circ$. До этой концентрации наблюдаются два типа углов $\sim 89^\circ$ и $\sim 71^\circ$.

На основании наблюдений можно сделать следующие выводы:

Примесь в кристаллах NH_4Cl проявляет себя в двух видах взаимодействия: а) при высокой концентрации примеси ($\sim 0,2 \text{ г/см}^3$) примесь откладывается на поверхности кристаллов хлорида аммония и экранирует ее рост (механический эффект); б) при низких концентрациях действие примеси проявляется в изменении углов между ветвями дендритов и способствует переходу дендритной формы роста в скелетную (химический эффект); Действие обоих факторов приводит к переходу дендритной формы кристаллов к ограниченной.

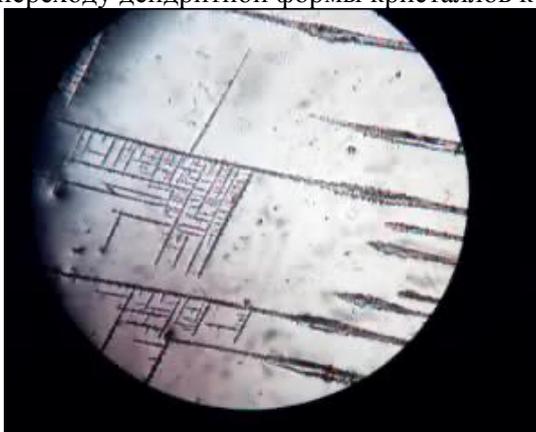


Рис 1. кристаллы хлористого аммония при наличие примеси.

Математическое моделирование ВАХ многослойной структуры

металл-полупроводник-металл

Бляблин Владимир Александрович

Владимирский государственный университет

Устюжанинов Валерий Николаевич

neon@vladimirpeople.com

Проверяется возможность формирования участка с отрицательным дифференциальным сопротивлением на вольт-амперной характеристике структуры типа металл - полупроводник – металл с омическими контактами (рис. 1). Решаются задачи теплопроводности и электропроводности для полупроводникового слоя. Работа посвящена совместному решению задачи электро- и теплопроводности полупроводника с целью определения вида вольт-амперной характеристики.

Расчет производился для структуры с теплоизолированными боковыми стенками и размерами: толщиной $d=4 \cdot 10^{-5}$ м; длиной и шириной $a=b=10^{-4}$ м. В качестве полупроводника использовался кремний n-типа слаболегированный фосфором.

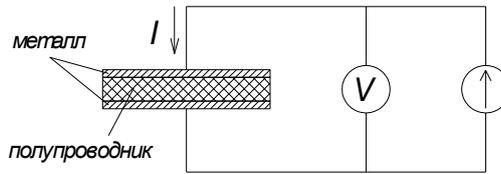


рис. 1

Расчет производился с использованием общеизвестных выражений для проводимости полупроводников на основе пространственно-временного распределения температуры в пластине полупроводника, отражаемого уравнением теплопроводности

$$\rho \cdot c \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \lambda \cdot \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} + I^2 R.$$

Считалось, что в первом приближении подвижности носителей, эффективная плотности состояний, ширина запрещенной зоны, теплоемкость, коэффициент теплопроводности, объем полупроводника остаются постоянными в исследуемом интервале изменения температур.

Решение данной задачи было осуществлено при помощи пакета Partial Differential Equation Toolbox и встроенных функций MatLab.

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

1. Рассчитано семейство вольт-амперных характеристик при различных значениях концентрации донорных примесей N_d (рис. 2).

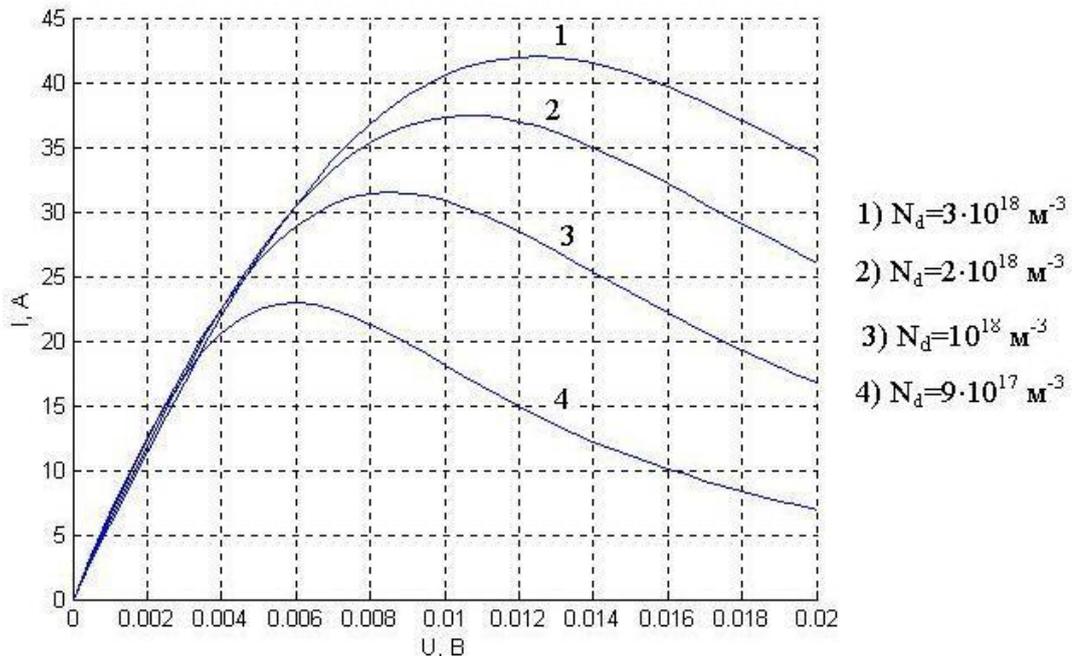


рис. 2

2. Нагрев слоя практически до максимальной температуры достигается за несколько десятков микросекунд, то есть при работе прибора на этом участке частота сигнала должна быть в районе десятков кГц.

3. Вид и численные значения приведенных зависимостей определяются параметрами полупроводника. При их выборе следует учитывать допустимые значения температур, токов, концентрации примесей, толщины полупроводникового слоя, определяемые видом материала, особенностями технологического процесса. Все вместе они задают некоторые ограничения, которые необходимо выполнять при разработке подобных структур.

Молекулярно-динамическое моделирование синтеза InGaAs/GaAs нанотрубок

Боле́ста Алексе́й Влади́мирович

Фомин Васи́лий Миха́илович

Головнев И́горь Фе́дорович

Институт Теоретической и Прикладной Механики СО РАН

bolesta@itam.nsc.ru

Одним из направлений в области развития нанотехнологий является синтез трехмерных цилиндрических структур с размерами порядка десятков нанометров – нанотрубок. В последние годы идет активный поиск методов, позволяющих использовать стандартные технологии и процессы самоорганизации для создания наноструктур. Именно такой метод предложен и реализован в институте физики полупроводников СО РАН [1]. Суть данного метода получения нанотрубок заключается в следующем (см. рис.1). На подложке с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии создается многослойная напряженная гетероструктура. Затем жертвенный слой (в данном случае это слой AlAs) на подложке убирается селективным травлением, и освобождаются верхние слои. Из-за несогласованности параметров атомных решеток возникает момент сил, приводящий к сворачиванию слоев в цилиндрическую структуру диаметром от 2 нм до 100 мкм. Теоретические исследования сворачивания напряженного бинарного слоя проводились в рамках теории упругости [2]. При этом остается открытым вопрос уточнения таких механических параметров пластин наномасштабной толщины, как модуль Юнга, коэффициент Пуассона и изгибная жесткость, которые могут значительно изменить оценки диаметра получаемой нанотрубки. Особую актуальность в данном случае приобретает фундаментальная проблема применимости механики сплошных сред к задачам с пространственными масштабами порядка десятков ангстрем, когда существенна дискретность среды. Указанием к этому являются экспериментальные данные для диаметров нанотрубок, получающихся при сворачивании очень тонких (толщиной всего несколько монослоев) гетероструктур [1]. Диаметры таких нанотрубок меньше значений предсказываемых теорией упругости.

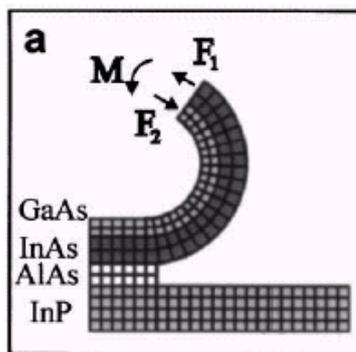


рис.1

В настоящей работе представлены результаты исследования синтеза нанотрубок на атомном уровне с помощью метода молекулярной динамики. Межатомное взаимодействие

учитывалось при помощи потенциальных функций в форме Терсофа с набором констант, предложенным в [3] для системы InGaAs. Взаимодействие с жертвенным слоем в процессе селективного травления моделировалось добавлением в потенциальную энергию системы внешнего потенциала. Уравнения движения интегрировались с помощью скоростной модификации схемы Верлета.

В результате показано, что получаемые в молекулярно-динамических расчетах нанотрубки имеют меньший радиус по сравнению с предсказаниями теории упругости. Причем для самых тонких гетероструктур расхождение превышает 30 %, а с увеличением толщины гетероструктуры оно пропадает. С целью объяснения данного расхождения предложена “простая дискретная модель”, которая дает поправку к формуле теории упругости за счет учета дискретности среды. Сравнение радиусов кривизны нанотрубок, полученных в результате молекулярно-динамического моделирования R_{MD} , в результате применения теории упругости R_{el} и упомянутой выше “простой дискретной модели” R_{discr} , в зависимости от суммарной толщины начальной гетероструктуры (см., например, рис.2 для гетероструктуры InAs/GaAs) позволяет сделать следующий вывод. Несмотря на то, R_{discr} также как и R_{MD} меньше результата применения теории упругости R_{el} . собственно дискретность среды не является основным фактором, определяющим отличие результатов молекулярно-динамического моделирования от предсказаний теории упругости. Исследование распределения потенциальной энергии по объему деформированной гетероструктуры показало, что таким фактором является наличие поверхностных слоев, структура межатомного взаимодействия в которых существенно отличается от взаимодействия в объеме материала.

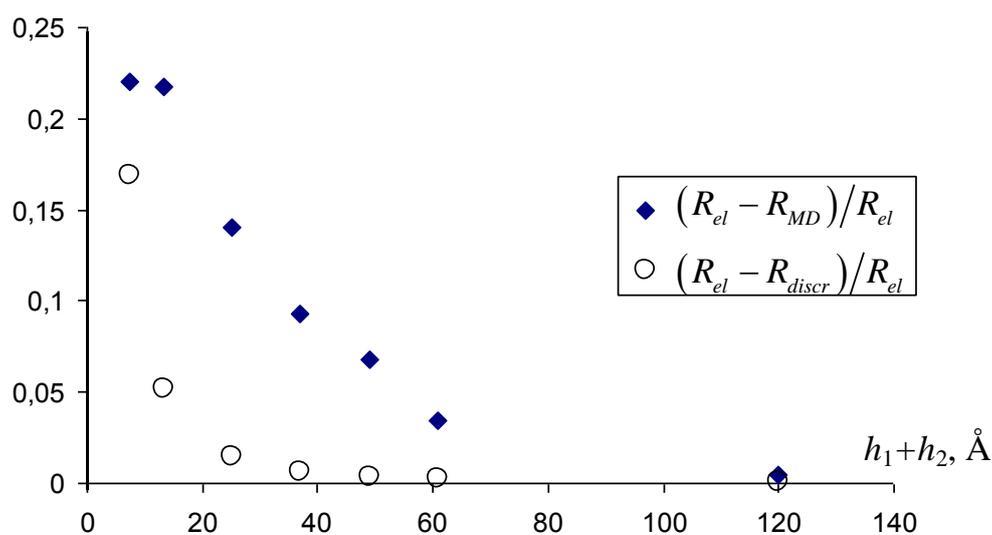


рис.2

Список публикаций:

- [1] Prinz V.Ya., Seleznev V.A., Gutakovskiy A.K., Chehovskiy A.V., Preobrazhenskii V.V., Putyato M.A. and Gavrilova T.A., *Physica E*, **6**, 828–831. (2000).
- [2] Морозов Н.Ф., Семенов Б.Н. и Товстик П.Е., *Физическая мезомеханика*, **5**, 3, 5–8 (2002).
- [3] Nordlund K., Nord J., Frantz J. and Keinonen J., *Computational Materials Science*, **18**, 283–294 (2000).

Исследование термодинамических свойств керамики



Бондарев Виталий Сергеевич

Горев Михаил Васильевич, Флёров Игорь Николаевич

Институт физики им. Киренского

Флёров Игорь Николаевич, д.ф.-м.н

Vbondarev@yandex.ru

Твердых растворов перовскитоподобных соединений: сегнетоэлектрика BaTiO_3 , антисегнетоэлектрика CaTiO_3 и параэлектрика BaZrO_3 интенсивно исследуются благодаря их удивительным физическим свойствам, а именно большим значением диэлектрической проницаемости и электрострикционным эффектом [1]. При определенных концентрациях сегнетоэлектрической, антисегнетоэлектрической и параэлектрической компонент образуются соединения с релаксорными свойствами. Именно такое соединение $\text{Ba}_{0.92}\text{Ca}_{0.08}\text{Ti}_{0.76}\text{Zr}_{0.24}\text{O}_3$ в виде керамики и исследовалось в данной работе.

Основное внимание при исследовании соединения $\text{Ba}_{0.92}\text{Ca}_{0.08}\text{Ti}_{0.76}\text{Zr}_{0.24}\text{O}_3$ уделялось обнаружению методом адиабатической калориметрии в режиме непрерывных и дискретных нагревов аномального поведения теплоемкости вблизи особых температурных точек, характерных для релаксорных материалов, а именно: T_m – температуре максимум диэлектрической проницаемости; T_d – температуре отклонения диэлектрической проницаемости от закона Кюри - Вейсса; T_c – температуре перехода в сегнетоэлектрическое состояние.

Аномальное поведение теплоемкости было обнаружено при всех характерных для релаксоров особых температурных точках. Аномалия теплоемкости при температуре Бёрнса T_d связана с ромбоэдрическим искажением решетки и возникновением полярных нанодоменов [1]. Аномалия теплоемкости, совпадающая по температуре с максимумом диэлектрической проницаемости при T_m , объясняется в рамках сферической модели случайных связей - случайных полей [2]. Численные расчеты термодинамических характеристик в рамках этой модели качественно согласуются с полученными экспериментальными данными. Небольшая аномалия теплоемкости была обнаружена и при T_c , когда происходит фазовый переход в сегнетоэлектрическое состояние с возникновением макроскопической поляризации.

Для исследованного соединения величина изменения энтропии, ΔS , мала и близка к значению 0.35 Дж/мольК. Такое малое изменение энтропии свидетельствует о преобладании процессах типа смещения в механизме фазового перехода и характерно для барий содержащих перовскитоподобных соединений, в которых ион типа А, как правило, не разупорядочен и не вносит существенного вклада ни в поляризацию, ни в энтропию.

Коэффициент теплового расширения $\text{Ba}_{0.92}\text{Ca}_{0.08}\text{Ti}_{0.76}\text{Zr}_{0.24}\text{O}_3$, также как и теплоемкость, имеет небольшие аномалии при температурах T_d , T_m и T_c . Экспериментально определена зависимость деформации от температуры, которая определяется суммой вкладов от линейного теплового расширения и электрострикционной деформации, обусловленной наличием в образце полярных нанодоменов ниже температуры Бёрнса. Из данных о деформации рассчитана зависимость среднеквадратичной поляризации от температуры.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Минпромнауки (грант НШ 939.2003.2) и Красноярского Краевого Фонда Науки (грант 13G132).

Список публикаций:

[1]. J. Ravez and A. Simon, *J. Mater. Chem.* **9**, 2829 (1999).

[2]. R. Pirc and R. Blinc *Phys.Rev.* **B60**, 13470 (1999).

Электронная структура кремниевых и кремниво-бариевых клатратов

Борщ Надежда Алексеевна

Переславцева Наталья Сергеевна

Воронежский государственный университет

Воронежская государственная технологическая академия

Переславцева Наталья Сергеевна, к.ф.-м.н

phssd18@main.vsu.ru

Кремниевые клатраты, легированные атомами щелочных и (или) редкоземельных металлов, интенсивно исследуются в последние несколько лет, как экспериментально, так и теоретически. Прежде всего это связано с необходимостью поиска новых материалов, которые могут ускорить переход от микро- к наноэлектронике. Кремний является самым широко используемым полупроводником, поэтому основное внимание исследователей направлено на получение именно кремниевых наноструктур. Кремний, кристаллизованный в клатратную структуру, впервые был получен ещё в 1965 году. Чисто кремниевые клатраты являются крайне неустойчивыми, и для их стабилизации необходимо внедрять в полости клатратной структуры атомы металлов. При этом оказалось, что свойства клатрата напрямую зависят от сорта легирующих атомов. Так, клатраты $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$ являются сверхпроводниками при температуре 8 К.

В данной работе представлены результаты расчетов электронной структуры клатратов Si_{46} и $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$. Расчеты были выполнены методом линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) в приближении функционала плотности с использованием обменно-корреляционного потенциала в аппроксимации и скалярно-релятивистского приближения. Для расчетов использовался базис 1213 ЛППВ, в разложении базисной функции по сферическим гармоникам учитывались вклады до $l_{\max}=5$.

На основе зонного расчета были получены полные и парциальные плотности электронных состояний (DOS). Для клатрата $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$ проводится сопоставление рассчитанной полной DOS с экспериментальным фотоэлектронным спектром. Анализ полученных плотностей электронных состояний дал следующие результаты.

1. Клатрат Si_{46} является полупроводником с шириной запрещенной зоны около 1.7 эВ. Кремниво-бариевый клатрат имеет металлические свойства, плотность состояний на уровне Ферми составляет около 27 сост./эВ*эл.яч.

2. Около дна валентной зоны основной вклад в полную DOS вносят S_{is} -состояния, в прифермиевской области доминирует вклад S_{ip} -состояний. В клатрате $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$ вклад состояний атомов бария в полную DOS является незначительным. Область, в которой больший вклад в полную плотность вносят S_{ip} -состояния, отделена от области с преобладанием S_{is} -состояний щелью шириной в 1.4 эВ в клатрате Si_{46} и щелью в 1.8 эВ в клатрате $\text{Ba}_8\text{Si}_{46}$.

3. Сопоставление рассчитанной полной DOS с экспериментальными фотоэлектронными спектрами показало хорошее согласие теории и эксперимента. Энергетическое положение основных особенностей и соотношение их по интенсивности в основном совпадают.

Рентгеновская томография с субмиллиметровым разрешением на длинах волн 0,7-2.29 Å.

Бузмаков Алексей Владимирович

Сенин Р.А. , Тудоси Г.А. , Черемухин Е.А.

Московский Государственный Университет им. М.В. Ломоносова

Институт кристаллографии РАН

Асадчиков Виктор Евгеньевич, д.ф-м.н

zju@yandex.ru

Рентгеновская томография в последние десятилетия все шире используется как в медицине, так в дефектоскопии технологических изделий. Для реконструкции внутренней структуры объекта в рентгеновской томографии используется набор его теневых проекций, полученных путем освещения с различных направлений. Отметим, что в подавляющем большинстве рентгеновских томографов используется жесткое тормозное рентгеновское излучение с характерной длиной волны менее 0,2 Å. Выбор такого излучения справедлив только для исследования структуры сильно поглощающих либо протяженных объектов. В то же время для исследования структуры объектов с характерными размерами порядка сантиметра, состоящих из легких элементов, и в частности, углеродсодержащих материалов, разумнее по нашему мнению использовать более мягкое излучение с длиной волны 0,7-2.29 Å.

Ранее был создан многоцелевой пятикружный рентгеновский дифрактометр [1]. Этот прибор отличается секундной точностью угловых перемещений исследуемого образца, кроме того, в его состав входит позиционно-чувствительный детектор длиной 100 мм, имеющий 1000 чувствительных элементов. Совокупность этих факторов позволяет использовать данный дифрактометр для томографических исследований углеродсодержащих и биологических объектов. В наших условиях томографический эксперимент состоял в получении теневых проекций (отличающихся друг от друга углом поворота объекта в интервале от 0 до 180 градусов) от тонкого слоя образца. Толщина облучаемого слоя определялась условиями коллимации рентгеновского пучка. Далее образец опускался, и производилась съемка следующего слоя. При этом размер области исследования составляет несколько сантиметров, а разрешение (размер разрешаемой детали) на получающихся томограммах может достигать 0,1 мм. Важно отметить, что характеристики применяемого в экспериментах излучения таковы, что с одной стороны, объект с названными выше размерами не является совершенно непрозрачным, а с другой стороны, поглощение в образце все же существенно даже для таких мягких биологических тканей, как эпитексиальные покровы.

Для оценки справедливости наших утверждений и получения интересной для биологов структурной информации нами был исследован гетерогенный по плотности биологический образец – однолетний самец сибирского углозуба (*Salamandrella keyserlingii*). Образец был зафиксирован в 4% параформальдегиде на фосфатном буфере и лиофилизирован через критическую точку. Дополнительного контрастирования не применялось.

Предварительный анализ тканей сибирского углозуба показал, что даже наименее контрастные для рентгена органы позвоночных могут быть дифференцированы при использовании излучения 1.54 Å.

Условия проведения томографических экспериментов таковы:

- Число положений гониометра с образцом – 72 (в диапазоне от 0 до 180°)
- Число информационных каналов детектора – 250
- Время экспозиции одной теневой проекции – 30 сек.
- Толщина одного исследуемого слоя - 100 мкм
- Источник – рентгеновская трубка с медным анодом и точечным фокусом.

Как показывают эксперименты, для данного исследуемого образца поглощение меняется вдоль его длины почти на два порядка при сохранении линейности счета детектора. Значительный динамический диапазон регистрируемых коэффициентов поглощения в сочетании с высокой точностью угловых перемещений обеспечивает, по нашему мнению, достаточно высокое качество реконструкции.

Для восстановления изображений авторами был разработан новый метод решения задачи компьютерной томографии (КТ), основанный на применении теории измерительно-вычислительных систем (ИВС) [2,3]. Особенность этого подхода состоит в том, что для реконструкции распределения коэффициента поглощения объекта использована модель измерений, учитывающая как параметры детектора, так и статистическую погрешность измерений. Использование проекции вектора данных на подпространство, обеспечивающее наименьшую погрешность оценки восстановления, позволяет снизить размерность задачи и построить так называемую «эффективную» модель измерений. Сравнение метода с более быстрым классическим методом свертки и обратной проекции [4] - показало, что новый метод может быть использован для решения задач КТ в случаях, когда время вычислений не критично, но важно получать точные оценки исследуемого объекта с контролируемой погрешностью.

На рис.1 представлен результат восстановления пространственной структуры сибирского углозуба.

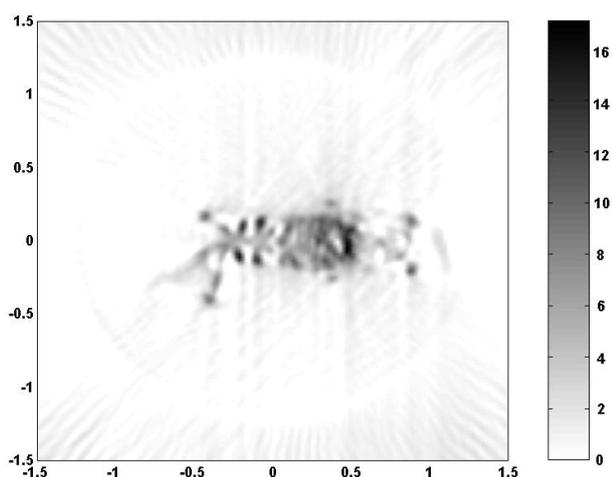


рис 1.

Сравнение данных рентгеновской томографии с результатами гистологических исследований показывает, что возможна не только визуализация различия в плотностях хрящевых и костных элементов скелета, но анализ мягких тканей. В частности удается идентифицировать неминерализованные покровы, межтканевую мезенхиму и функциональные клеточные конструкции внутри этих тканей. Полученные результаты подтверждают целесообразность использования излучения с длиной волны $0.7-2.29\text{\AA}$ для исследования пространственной структуры углеродсодержащих и биологических объектов и дают исследователям новые экспериментальные возможности, превышающие таковые для известных коммерческих микротомографов.

Список публикаций:

[1] Алаутдинов Б.М., Асадчиков В.Е., Мчедlishvili Б.В., Шишков В.А., Кожевников И.В. «Рентгеновский многоцелевой дифрактометр с горизонтальным расположением образца» // Научное приборостроение, 1995, т.5, N1-2, с.с. 95 – 11

[2] Пытьев Ю.П. «Математические методы интерпретации эксперимента» // М.: Высшая школа, 1989. – 352 с.

[3] Чуличков А.И. «Основы теории измерительно-вычислительных систем сверхвысокого разрешения (линейные стохастические измерительно-вычислительные системы)» // Тамбов:Издательство ТГТУ, 2000, 140 с.

[4] Наттерер Ф. «Основы компьютерной томографии» // М.:Мир, 1991. – 288с.

Залечивание трещин в щелочногалогидных кристаллах при внешних воздействиях

Бутягин Александр Алексеевич

Тялин Юрий Ильич

Тамбовский Государственный Университет им. Г.Р. Державина

Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н

feodorov@tsu.tmb.ru

В работе изучалась возможность залечивания трещин в кристаллах LiF при локальном механическом воздействии на ее вершину. Локальная нагрузка в вершине трещины создавалась в результате нагрева или рентгеновского облучения материала в малой окрестности вершины трещины. В этом случае в зоне воздействия образуются сжимающие напряжения, которые можно использовать для восстановления нарушенной сплошности. Отличие данных схем нагружения образцов состоит в том, что температурные напряжения после охлаждения образца исчезают, а напряжения, созданные при облучении, могут существовать в кристалле достаточно долго и удерживать трещину в закрытом состоянии даже в том случае, если сплошность материала не восстановится.

Из крупных блоков монокристаллов LiF по плоскостям спайности выкалывали призматические образцы размером 3x8x40 мм. В образцах создавалась зародышевая трещина длиной $L=(20 - 30)$ мм в плоскости (001). Трещина располагалась симметрично относительно широкой грани образца.

Дислокационную структуру вершины остановившейся трещины выявляли химическим травлением образцов в водном растворе хлористого железа. Получение нужной длины трещины достигалось скачкообразным продвижением ее под действием малой ударной нагрузки. Длина отдельного скачка трещины при этом составляла (2 – 3) мм. При таком характере распространения трещины в местах ее остановки образуются линии скольжения в виде характерного дислокационного “креста”.

Для получения микротрещин при индентировании использовались нагрузки 0.5, 1 и 2 N. При таких нагрузках характерный размер образующихся трещин составлял 20 – 60 μm . На небольшой площадке зарождалось несколько микротрещин. Затем ее подвергали либо нагреву, либо рентгеновскому облучению через свинцовую маску с отверстием диаметром 2 мм. Фиксировались размеры трещин до, и после воздействия. В опытах по локальному тепловому воздействию мы не обнаружили изменения длин микротрещин. При рентгеновском облучении отмечено небольшое уменьшение их размеров. При больших дозах облучения эффект будет усиливаться. Хотя отсутствие залечивания при температурном воздействии говорит о том, что микротрещины, образующиеся при индентировании, являются достаточно “жесткими”. Это может быть связано с геометрией их поверхностей {110}, не являющихся плоскостями спайности. Трещины в таких плоскостях имеют сильно развитый поверхностный рельеф, препятствующий залечиванию. Травление облученных образцов не выявляло канавок, характерных для участков залеченных трещин. Это говорит о том, что в данном случае имеет место только визуальное уменьшение размеров трещины (восстанавливается оптический контакт).

Как правило, при однократном тепловом воздействии на образец исходная трещина закрывается на участке с размерами порядка зоны воздействия (2 – 3 mm). Чаще всего трещина залечивается полностью по всей указанной длине. Фронт исходной трещины не является прямолинейным, а слегка изогнут в сторону движения трещины. С ростом толщины образца фронт трещины распрямляется, но овальная форма сохраняется для всех размеров кристаллов, используемых в наших экспериментах.

При малых температурах нагрева и в случае “жестких” кристаллов закрытие трещины идет в результате обратимого скольжения по тем же полосам и линиям, которые формируются в процессе остановки трещины. В этом случае появление новых интенсивных зон пластической деформации не наблюдалось. В “мягких” кристаллах и при максимальных температурах нагрева зоны термического влияния деформируются значительно. Отмечается не только увеличение размеров полос в вершине исходной трещины, но и интенсивная пластическая деформация в зоне термического контакта по другим плоскостям скольжения.

Исследование сегнетоэластического фазового перехода в монокристалле $K_2Ba(NO_2)_4$

Васильева Александра Владимировна

Воронежский Государственный Технический Университет

Иванов Олег Николаевич, д.ф-м.н

vasiasialex@mail.ru

Исследования физических свойств кристаллов, обладающих структурными фазовыми переходами, традиционно занимают значительное место в физике твердого тела. Особый интерес представляют фазовые переходы, сопровождающиеся возникновением спонтанной деформации и двойникованием образцов в низкосимметричной фазе - сегнетоэластические фазовые переходы. Сегнетоэластики являются самыми многочисленными представителями класса веществ, претерпевающих структурные фазовые переходы; семейство сегнетоэластиков постоянно пополняется. Например, среди недавно открытых высокотемпературных сверхпроводников есть соединения, одновременно обладающие и сверхпроводящими и сегнетоэластическими свойствами. Можно утверждать, что изучение сегнетоэластиков является актуальной проблемой, так как позволяет установить общность сегнетоэластических фазовых переходов с другими фазовыми переходами, а также изучить влияние сегнетоэластичности на физические свойства твердых тел. Соединение $K_2Ba(NO_2)_4$ является одним из представителей сегнетоэластических кристаллов, удобным для изучения характерных особенностей физических свойств сегнетоэластиков. При охлаждении это соединение испытывает несобственный сегнетоэластический фазовый переход при температуре 419 К, сопровождающейся изменением симметрии $6/mmm \rightarrow mmm$. В ромбической фазе наблюдаются упругие двойники. Вблизи температуры фазового перехода двойниковая структура является довольно бильной и может перестраиваться при внешних воздействиях.

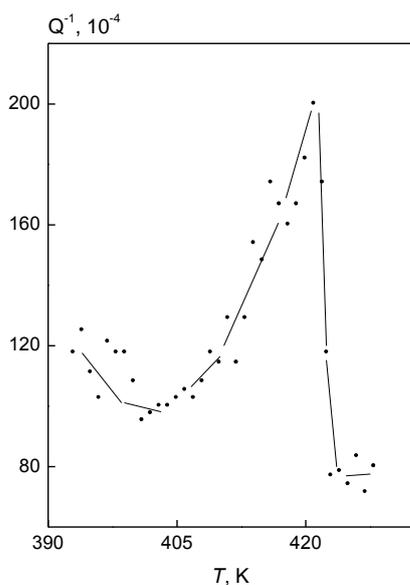


рис. 1

Целью данной работы явилось исследование

сегнетоэластических свойств монокристалла $K_2Ba(NO_2)_4$.

Исследованный монокристалл был выращен в Институте кристаллографии (г. Москва) из водного раствора. Основные эксперименты были проведены на установке на основе обратного крутильного маятника, специально разработанной для изучения сегнетоэластических материалов. В ходе проведения экспериментов были измерены низкочастотные (частота ~ 10 Гц) модуль сдвига G и внутреннее трение Q^{-1} при амплитуде деформации $\sim 10^{-4}$. Измерения были проведены на образцах в виде прямоугольных брусков размерами $2 \times 2 \times 12$ мм, ориентированных таким образом, чтобы их длинная сторона совпадала с одной из кристаллографических осей кристалла: a , b или c (x -, y - или z -ориентация соответственно). Температуру измеряли с помощью хромель-алюмелевой термопары с погрешностью, не превышающей $0,3$ К.

Было установлено, что переход в сегнетоэластическую фазу сопровождается аномальными изменениями как упругих, так и неупругих свойств, обнаруженных на образцах всех трех кристаллографических ориентаций. В качестве примера приведена температурная зависимость внутреннего трения для образца x -ориентации (рис. 1). Видно, что на кривой $Q^{-1}(T)$ наблюдается пик внутреннего трения как раз при температуре сегнетоэластического фазового перехода. При той же температуре на температурной зависимости G существует излом, соответствующий упругому смягчению образца в сегнетоэластической фазе. Такое упругое смягчение может быть связано с появлением двойникового вклада в деформацию образца в ромбической фазе. Наличие пика внутреннего трения вблизи температуры структурного фазового перехода является характерной особенностью как соединений с фазовым переходом первого рода, так и соединений с фазовым переходом второго рода. Для однозначного определения рода фазового перехода и идентификации механизма внутреннего трения требуется проведение дополнительных экспериментов.

Для установления вклада динамики упругих доменов в низкочастотные упругие и неупругие свойства, в настоящей работе также было изучено влияние амплитуды деформации и внешнего постоянного механического напряжения на внутреннее трение и упругость монокристалла $K_2Ba(NO_2)_4$ в сегнетоэластической фазе.

Необходимо заметить, что согласно литературным данным температуры выше ~ 450 К соответствуют химическому разложению или даже плавлению соединения $K_2Ba(NO_2)_4$. В этом случае изменение упругих и неупругих свойств обусловленное структурным фазовым переходом, может маскироваться изменением этих свойств в результате химического разложения или плавления.

Применение теории фононной силы трения к исследованию поляронного эффекта в полупроводниках

Воробьев Дмитрий Александрович

Нижегородский государственный педагогический университет

Ефремов Геннадий Фёдорович, д. ф-м.н

vorobyev@nnspsu.ru

Для современной физики конденсированных сред и, в частности, твердотельной электроники характерна миниатюризация создаваемых приборов. Это требует исследования физических процессов, происходящих на малых расстояниях за очень короткие промежутки времени. Следовательно, запаздывание взаимодействия между электроном и фононным полем также становится существенным фактором. Традиционные методы квантовой кинетики оказываются малоэффективными для исследования подобных эффектов.

В работе изложены основные положения флуктуационно–диссипационной теории для нелинейных квантовых систем, на основании которых получены стохастические уравнения для электрона, взаимодействующего с фононным полем решетки во внешнем высокочастотном электрическом поле. Стохастические уравнения для переменных динамической подсистемы – электрона, играют роль, подобную кинетическим уравнениям. Вместе с тем, эти уравнения имеют значительно более широкую область применимости. Во-первых, стохастические уравнения позволяют вычислять в принципе любые статистические характеристики системы. Во-вторых, динамическая подсистема может быть исследована как в квазиравновесном, так и в сильно неравновесных состояниях.

На основе микроскопического подхода получено строгое выражение для фононной функции Грина с учётом дебаевского экранирования кулоновского взаимодействия электрона с ядрами кристаллической решетки. Найдено выражение для фононной силы трения, действующей на электрон при его движении в фононном термостате с учетом запаздывания взаимодействия. Исследована частотная зависимость диссипации энергии электрона в высокочастотном поле, взаимодействующего с фононным полем решетки. Одним из основных результатов данной работы является определение частотной и температурной зависимости добавки к эффективной массе электрона при его перемещении в поле колебаний кристаллической решетки. Тем самым, получено выражение для частотной зависимости эффективной массы полярона.

Список публикаций:

[1] Ефремов Г.Ф. Бочков Г.Н. *Нелинейные стохастические модели процессов и систем*. Горький (1978).

[2] Ефремов Г.Ф. Мареева О.В. *Модель броуновского движения классического электрона в фононном термостате*.// Вестник ННГУ Математическое моделирование и оптимальное управление. Н. Новгород ННГУ Вып. 1(20) (1999).

[3] Ефремов Г.Ф. Мареева О.В. Воробьев Д.А. *Стохастическое уравнение для электрона проводимости в фононном поле*.// Вестник ННГУ Математическое моделирование и оптимальное управление. Н. Новгород ННГУ Вып.1(23) (1999).

[4] Ефремов Г.Ф. Мареева О.В. Воробьев Д.А. Шарков В.В. *Статистическая теория радиационной силы трения электрона в фотонном и фононном полях*.// Актуальные проблемы статистической радиофизики (малаховский сборник). Н. Новгород. Том 2 (2003).

Электронная проводимость и термо-эдс в нестехиометрических сплавах $\text{Li}_{0.25}\text{Cu}_{1.75-8}\text{Se}$

Галлямова Эльвира Рафаэлевна

Зиннуров Ильнур Биктимирович.

Башкирский государственный университет

Балапанов Малик Хамитович, доцент, к.ф.-м.н

GallyamovaGR@rambler.ru

Халькогениды меди представляют значительный интерес для полупроводниковой электроники в связи с возможностью легко управлять их электронными свойствами, изменяя их степень нестехиометричности электрохимическими методами. В ряде устройств указанные материалы уже используются - например, Cu_{2-8}S - в качестве р-ветвей термоэлектрических генераторов. Легирование халькогенидов различными элементами может открыть новые возможности для практического использования этих полупроводников. В данной работе исследуется электронная проводимость и термо-эдс нестехиометрического селенида меди $\text{Cu}_{1.75}\text{Se}$, легированного литием до состава $\text{Li}_{0.25}\text{Cu}_{1.75}\text{Se}$. Нестехиометрический селенид меди Cu_{2-8}Se является самолегирующимся полупроводниковым соединением р-типа со смешанной

электронной (по дыркам) проводимостью, в котором вакансии меди играют роль акцепторной примеси. Литий при легировании $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$, скорее всего, выступает в роли одновалентной донорной примеси. Таким образом, изучаемые составы $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ имеющие одинаковое содержание донорной и акцепторной примеси, должны проявлять свойства скомпенсированных полупроводников.

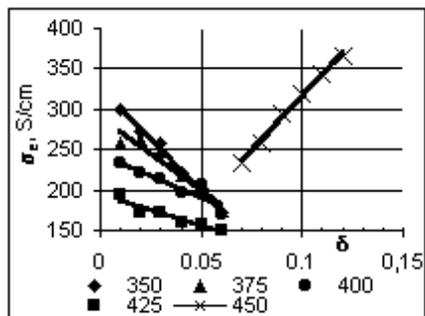


Рис.1

На рис.1 представлены композиционные зависимости электронной проводимости при 350, 375, 400, 425 и 450 °С, полученные при выводе меди из $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$. Введение лития совершенно изменяет поведение электронной проводимости σ_e при вариации содержания металла. В кубической фазе селенида меди $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ электронная проводимость линейно растет с ростом нестехиометричности δ . На рис. 1 наблюдается линейный спад проводимости с ростом δ , который сменяется на линейный рост при $\delta \geq 0,06$.

Отличие зависимостей $\sigma_e(\delta)$ в $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ и $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75-\delta}\text{Se}$ может быть связано с различием механизмов дефектообразования. Возможно, что введение лития в решетку $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ сопровождается образованием поляронов. Из наклона прямых $\sigma_e(\delta)$ определены подвижности носителей, которые приведены в таблице. Подвижности дырок в $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ ниже, чем в бинарном $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$. Такие значения подвижности (менее $1 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$) характерны для прыжкового характера проводимости. В отличие от Cu_2Se , в котором подвижность зависит от температуры как $T^{-(2,1-2,4)}$, в $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ в области 350-450 °С подвижность падает при повышении температуры как $T^{-10,7}$. Это намного быстрее, чем по закону $T^{-3,2}$, следовательно, кроме уменьшения времени релаксации при нагревании происходит рост эффективной массы носителей.

В структурно-разупорядоченных электронно-ионных полупроводниках $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ существует уникальная возможность, используя метод кулонометрического титрования, изучать зависимость физических свойств непосредственно от уровня Ферми, так как эдс E электрохимической ячейки типа $\text{Cu}/\text{CuBr}/\text{Cu}_2\text{Se}/\text{C}$ представляет собой высоту уровня Ферми μ в фазе относительно уровня Ферми в металлической меди μ_{Cu}^0 :

$$\mu = \mu_{\text{Cu}}^0 + eE. \quad (1)$$

В работе получены и проанализированы зависимости $\alpha_e(E)$ и $\sigma_e(E)$ при 350, 375, 400, 425 и 450 °С.

На рис.2 при 400 и 425 °С (в области существования гексагональной фазы $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$) наблюдается линейный спад α_e с ростом E .

Коэффициент термо-эдс для сильно вырожденного электронного газа в случае простой параболической зонной структуры и степенной зависимости длины свободного пробега l электрона от его энергии (то есть $l \sim e^r$) описывается формулой Мотта

$$\alpha = \frac{\pi^2}{3} \frac{k}{e} (r+1) \frac{kT}{\mu}, \quad (2)$$

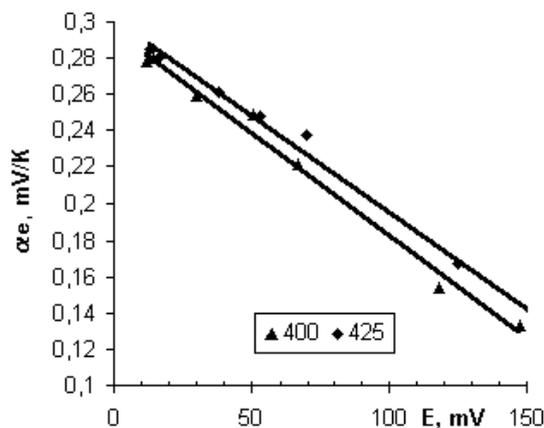


Рис.2

где уровень Ферми отсчитан от дна зоны проводимости. Фактор рассеяния r зависит от типа рассеяния и равен $r = 1$ – для рассеяния на оптических фононах выше температуры Дебая. В $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$ наблюдается практически линейный рост α_c с температурой, за исключением окрестностей фазовых переходов. Однако, анализ результатов показывает, что модель жесткой параболической зоны не дает согласия с экспериментом.

Электронная проводимость изучена как функция уровня Ферми. Показано, что снижение проводимости при вводе меди в нестехиометрический $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$ связано с продвижением уровня Ферми вглубь валентной зоны. Немонотонность зависимости $\sigma_c(\delta)$ может быть объяснена сложностью зонной структуры $\text{Cu}_{2-\delta}\text{Se}$, в котором 3d-зона меди лежит посередине 4p-зоны селена. Введение лития еще более осложняет зонную структуру, так как при такой концентрации образуется примесная зона лития (возможно и образование поляронной зоны, так как подвижность дырок мала). При своем движении уровень Ферми пересекает границы указанных зон, что и приводит к различным аномалиям в ходе зависимости $\sigma_c(\delta)$ и $\alpha_c(\delta)$.

Компьютерное моделирование тройных стыков границ зерен

Гимазов Азат Альбертович

Башкирский государственный университет

Шамсутдинов Миниахат Асгатович д.ф.-м.н

Институт проблем сверхпластичности металлов РАН

Назаров Айрат Ахметович д.ф.-м.н

Gimazov@ufacom.ru

Атомная структура тройных стыков границ зерен является одним из важнейших факторов, влияющих на свойства как самих границ, образующих стык, так и, в результате, на свойства материала, структура которого сформировалась в ходе деформации или иных методов воздействия. “Идеальный” тройной стык должен удовлетворять условию:

$$\theta_1 + \theta_2 + \theta_3 = \theta_0 \quad (1)$$

где θ_1 , θ_2 и θ_3 – векторы разориентировок границ наклона, составляющих тройной стык. Поворот θ_0 должен быть равен повороту, принадлежащему группе симметрии данной кристаллографической решетки.

При внешних воздействиях, например, при пластической деформации, вектора θ_1 , θ_2 и θ_3 могут изменяться неодинаково вследствие поглощения границами дислокаций и других дефектов. Таким образом, в тройном стыке могут возникать дисклинации [1].

Дислокацией, как известно, называется линия, ограничивающая часть плоскости с незавершенным сдвигом, т.е. линия между двумя областями с разными сдвигами. Аналогично, линия, разделяющая две плоскости с разными скачками поворота, называется дисклинацией. Мощность дисклинации характеризуется величиной вектора Франка $\vec{\omega}$ [2]. Дисклинации создают дальнедействующие поля упругих напряжений, влияющих на процессы диффузии по тройным стыкам и границам зерен, а также могут служить очагами разрушения поликристалла [3]. Различают клиновые дисклинации и дисклинации кручения. Простейший способ создания клиновой дисклинации заключается в вырезании и удалении в области границы зерна сектора с вершиной в центре тройного стыка и угловым размером ω , после чего образованная пустота закрывается путем азимутального смещения атомов всей оставшейся части. Так возникает положительная дисклинация мощностью ω [4]. Новая граница имеет угол разориентировки $\theta' = \theta + \omega$.

Цель работы – описание атомной структуры клиновой дисклинации, введенной в тройной стык.

В исходный цилиндрический образец, представляющий собой идеальный трикристалл, содержащий тройной стык границ наклона (310), (310) и (430) [001] в ГЦК кристалле, вводился дефект – дисклинация различных мощностей, после чего производилась релаксация. Релаксация проводилась методом молекулярной статики с помощью программы DYNAMO. В нашем случае для релаксации использовался потенциал межатомного взаимодействия для никеля, полученный методом погруженного атома.

Релаксация производилась минимизацией энергии (методом сопряженных градиентов), при температуре $T=0\text{K}$. При нахождении устойчивого состояния использовались периодические граничные условия вдоль линии тройного стыка. Размеры ячейки в плоскости ГЗ кратны периоду границы и всегда более чем в два раза превышают расстояние обрезания потенциала, которое для Ni составляет 4.8 \AA ($3a_0$). Это связано с требованием используемой программы моделирования и вытекает из так называемого метода минимального соседства при использовании периодических граничных условий.

Для введения в исходную структуру дефектов была написана компьютерная программа на языке программирования Turbo Pascal версии 7.0. Работа программы условно может быть поделена на три этапа:

1. На экран выводится исходная структура и пользователю предоставляется возможность выбора мощности дисклинации.

2. Вводится клиновая дисклинация указанным выше способом.

3. Азимутальное «схлопывание» зачастую приводит к образованию нестабильных границ. Третья часть программы позволяет вносить и удалять отдельные атомы в плоскость границы. Это позволило создавать структуры с более устойчивыми границами. Для наиболее точных расчетов построение структуры основывалось на модели структурных единиц [5] и вытекающей из нее дисклинационно-структурной модели ГЗ. В данной теории граница наклона [100] имеет четыре предпочтительные конфигурации, обозначаемые A, B, C и D. Первая и последняя – $\Sigma=1$ 0-градусные границы, стабильные конфигурации для типов B и C, используемые при моделировании, описаны в работе [6].

В ходе работы по компьютерному моделированию разработана методика внедрения дисклинации произвольной мощности в тройной стык, с модификацией преобразованной границы и распадом на единицы предпочтительных конфигураций, основанном на дисклинационно-структурной теории, в виде компьютерной программы с диалоговым интерфейсом.

Получены и изучены конфигурации тройных стыков для различных мощностей внедренных дисклинаций, рассчитаны энергии структур. Приближенный анализ показал преобладающее значение энергии дисклинации в деформированной структуре.

Обнаружена высокая устойчивость к разрушению тройного стыка при условии стабильности конфигурации составляющих границ. Критические мощности дисклинации, превышение которых ведет к разрушению кристалла, лежат в пределах $43^\circ \div 51^\circ$ в зависимости от размеров образца, конфигурации границ, составляющих стык

Список публикаций:

[1] Рыбин В.В., Зисман А.А., Золоторевский Н.Ю. Стыковые дисклинации в пластически деформируемых кристаллах // ФТТ.- 1985.- Т.27, №1.- С.181-186.

[2] Владимиров В.И. Романов А.Е. Дисклинации в кристаллах. Наука, 1986

[3] Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов.- М.: Металлургия, 1986.- 224 с.

[4] Жигелей Л.В., Михайлин А.И., Романов А.Е. Моделирование структуры ядра дисклинации методом молекулярной динамики. I. Двумерные дисклинации. ФТИ, 1989.

[5] Nazarov A.A., Romanov A.E. On the average misorientation angle of general tilt boundaries // *Philos. Mag. Lett.* 1989. V. 60. № 5. P. 187-193.

[6] Бачурин Д.В., Мурзаев Р.Т., Назаров А.А. Атомное компьютерное и дисклинационное моделирование границ наклона [001] в никеле и меди // ФММ, 2003, том 96, № 6, С. 11-17.

Численное исследование разрушения бездефектного нанокластера меди

Головнева Елена Игоревна

Институт Теоретической и Прикладной Механики СО РАН

Фомин Василий Михайлович, д.ф.-м.н

Головнев Игорь Федорович, к.ф.-м.н

elena@itam.nsc.ru

В настоящее время в связи с бурным развитием нанотехнологий становится актуальным получение ряда свойств наноструктур при различных внешних термомеханических воздействиях. Экспериментальное изучение явлений, сопровождающих процесс разрушения в нанокристаллах, практически невозможно, что вызвано масштабами явления в пространстве и во времени. Это обусловило необходимость проведения численных исследований процессов в нанокластерах при импульсном нагружении с помощью метода молекулярной динамики. Особое внимание в работе было уделено исследованию разрушения нанокластера меди при движении одной из его границ с постоянной скоростью. При этом реальную практическую значимость имеет получение критериев разрушения, аналогичных тем, которые используются в континуальной механике, а также вычисление необходимых констант, характеризующих тот или иной материал.

Целью настоящей работы является физический анализ явления повреждения и разрушения нанокристаллов от микро- до макромасштабного уровня под действием внешних механических нагрузок с помощью метода молекулярной динамики, получение количественных параметров и формулировка критериев, характеризующих этот процесс.

Для реализации поставленной задачи в работе рассматривалось одноосное растяжение бездефектного кристалла меди, левая грань которого закреплена, а правая двигалась с постоянной скоростью свободной границы. Это позволило моделировать разрушение при постоянной скорости движения свободной границы, варьируемой в диапазоне от 10 м/с до 1000 м/с. Физическая система и математический метод подробно изложены в работе авторов [1].

В работе на основе мезоанализа исследована эволюция различных физических параметров в разных сечениях кристалла в процессе внешнего воздействия. В число рассчитываемых параметров входят скорость центра масс, объем мезоячейки, внутренняя энергия мезоячейки, ее кинетическая и потенциальная составляющая, компоненты тензора напряжения σ_{xx} и деформации мезоячейки ε_{xx} . В работе рассчитана зависимость напряжения от деформации вдоль оси X для различных мезоячеек кристалла во всем исследуемом диапазоне скоростей. Оказалось, что для бездефектного нанокристалла вид этих характеристик не зависит ни от сечения, в котором выбрана мезоячейка, ни от локальной скорости деформации. На рис. 1 представлена зависимость напряжения от деформации $\sigma_{xx}(\varepsilon_{xx})$ вдоль оси X , полученная в результате МД расчетов (черная линия), и график полинома, аппроксимирующего расчетную кривую $\sigma_{xx}(\varepsilon)$ (серая линия). В линейной области расчетной зависимости $\sigma_{xx}(\varepsilon)$ получен модуль Юнга, равный 108.5 ГПа.

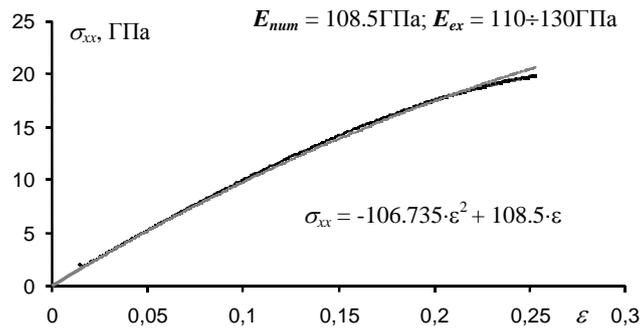


рис.1

В различных мезоячейках были рассчитаны зависимость силы взаимодействия между образовавшимися фрагментами кристалла от деформации $f_{xx}(\epsilon)$ и от времени $f_{xx}(t)$, энергия взаимодействия между фрагментами $\Delta U(t)$ и напряжение вдоль оси X $\sigma_{xx}(t)$ от времени (см. рис.2). Эти вычисления были проведены для всего интервала скоростей и для всех мезоячеек. Оказалось, что разрушение наблюдается именно в той мезоячейке, где функция $\sigma_{xx}(t)$ терпит разрыв первого рода. В результате проведенных исследований были найдены локальные критерии разрушения для бездефектного нанокристалла меди – это значения напряжения вдоль оси X и деформации в разрушающейся мезоячейке. Время, соответствующее моменту разрыва первого рода на графике $\sigma_{xx}(t)$, взято как момент разрушения.

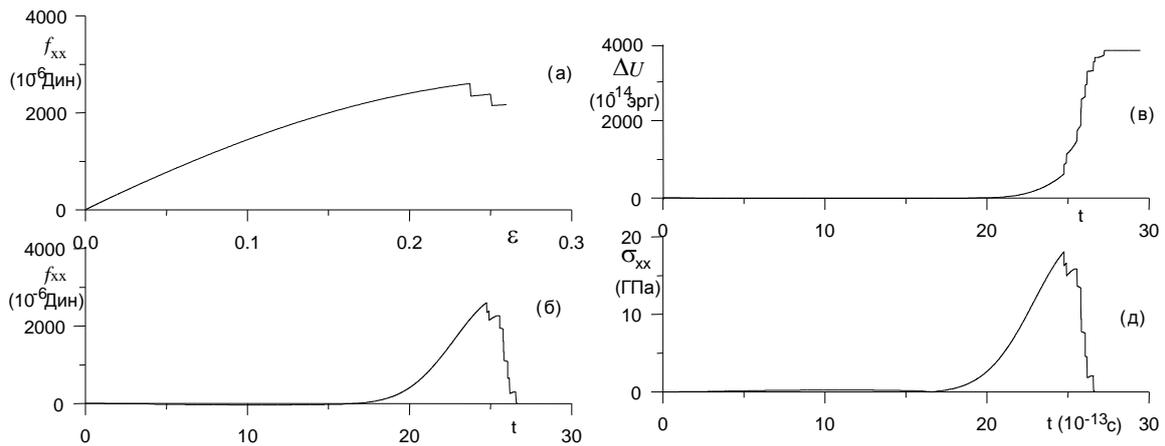


Рис.2

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

1. Зависимость $\sigma_{xx}(\epsilon)$ подчиняется закону нелинейной упругости (нелинейный закон Гука).
2. Функция $\sigma_{xx}(\epsilon)$ в мезоячейках не зависит от скорости деформации мезоячейки.
3. Получены локальные критерии динамического разрушения бездефектных наноструктур и найдены значения критических параметров для меди: $\sigma_{xxd} = 18.7$ ГПа; $\epsilon_d = 0.23$.

Список публикаций:

- [1] Головнев И.Ф., Конева Е.И. и Фомин В.М., *Физическая мезомеханика*, **4**, 5, 5-11 (2001).
 [2] Головнева Е.И., Головнев И.Ф. и Фомин В.М., *Физическая мезомеханика*, **6**, 2, 37-46 (2003).

Особенности локализации макродеформации в монокристаллах чистых ГЦК и ГПУ металлов

Гончиков Константин Викторович

Баранникова Светлана Александровна

Данилов Владимир Иванович

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

gkv@ispms.tsc.ru

Проводимые вот уже почти на протяжении 20 лет исследования явления локализации макродеформации на макромасштабном уровне на основе голографического метода двухэкспозиционной спеклинтерферометрии позволили установить, что ее характер определяется законом упрочнения материала и зависит от стадийности кривой нагружения. Данные исследования проводились на широком круге поликристаллических ГЦК и ГПУ материалов, а также легированных ГЦК монокристаллов [1].

Данная работа посвящена углублению этой тематики и представляет результаты исследования характера локализации макродеформации в монокристаллах чистых металлов. В качестве объектов исследования были выбраны классические материалы, такие как монокристаллы меди и никеля (ГЦК структура) чистотой 99.98% и монокристаллы цинка (ГПУ структура) чистотой 99.997%. Образцы меди и никеля были ориентированы для легкого скольжения, а образцы цинка для базисного скольжения, что обеспечивает необходимый для исследования трехстадийный вид кривых упрочнения. Растяжение образцов проводилось при комнатной температуре со скоростью $\dot{\varepsilon} = 6.7 \cdot 10^{-5} \text{ с}^{-1}$. Изучение поведения компоненты ε_{xx} тензора дисторсии полученной на основе метода двухэкспозиционной спеклинтерферометрии позволило установить следующее [1-3].

На стадии легкого скольжения в меди, деформация локализована по образцу в виде движущейся волны с длиной $\sim 4 \text{ мм}$, которая имеет среднюю скорость $V_{aw} = 3.8 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$. На рис.1а это изображено в виде зависимости положений максимумов локальных удлинений от времени. Движение их упорядочено так, что каждый очаг деформации в течение данной стадии движется по недеформированной части образца. После переходного участка, где наблюдается неупорядоченное во времени распределение ε_{xx} , картина локализации деформации на линейном участке (рис.1б) вновь упорядочивается и похожа на ту, что была на стадии легкого скольжения, но скорость движения очагов несколько выше $V_{aw} = 8 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$. При этом пространство образца оказывается продеформированным прохождением нескольких очагов. На параболической стадии движение зон локализации практически не происходит (рис.1в). На стадии легкого скольжения в никеле наблюдался один или два очага деформации, которые на протяжении стадии движутся с постоянной скоростью так, что одна и та же часть образца проходит только одним очагом, то есть единожды. На следующих стадиях картина аналогична меди.

Своеобразные результаты получились при исследовании локализации макродеформации в ГПУ монокристаллах цинка [3]. Характер локализации деформации на стадии А в цинке похож на то что наблюдается в никеле на стадии легкого скольжения для двух очагов. Здесь к началу стадии А формируется как правило три очага деформации, которые расположены в центральной части образца и по краям. Центральный очаг представляет собой три взаимосвязанные зоны локализации. В процессе деформирования наблюдалось следующее. Передний фронт этого очага движется к подвижному захвату, и к концу стадии достигаем первоначального положения третьего очага, который к тому времени так же с постоянной скоростью приходит непосредственно к краю образца у подвижного захвата. Таким образом, участок образца от центральной зоны локализации до подвижного захвата замечается движением очагов деформации единожды. На стадии В образец разделен неподвижными

очагами деформации на области в пределах которых движутся малоамплитудные очаги. Скорости движения этих очагов соизмеримы с теми, что получались ранее для других материалов [1, 2]. Впервые наблюдаемое существование неподвижных очагов в цинке на линейной стадии В, по-видимому, обуславливается сбросообразованием. Об этом, не проводя рентгенографических исследований, можно судить по поведению поворотной компоненты ω_z . На параболической стадии С ранее неподвижные очаги начинают движение к месту образования шейки, где далее произойдет разрушение.

Таким образом, основываясь на работах [1] и полученных данных [1-3] можно сделать вывод о том, что, несмотря на ряд особенностей характера деформирования изученных материалов, можно говорить об общих тенденциях автоволнового типа развития локализации макродеформации. Для всех изученных ранее материалов, было установлено, что скорости $V_{ав}$ обратно пропорциональны коэффициенту деформационного упрочнения нормированному на модуль сдвига. Это оказалось справедливо для меди и никеля, а так же для цинка на стадии В.

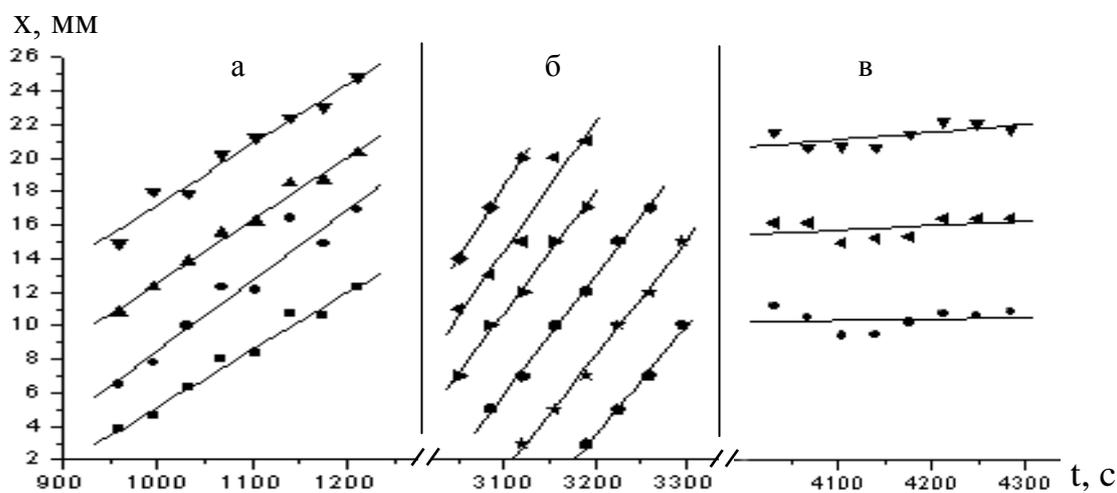


рис.1. Положения максимумов очагов деформации в меди от времени.

Список публикаций:

[1] Зуев Л.Б., Данилов В.И., Семухин Б.С. Пространственно-временное упорядочение при пластическом течении твердых тел. // Успехи физ. мет., 2002, Т.3.
 [2] Данилов В.И., Баранникова С.А., Гончиков К.В., Зуев Л.Б. Картины локализации пластической деформации в монокристаллах Си и Ni. // Кристаллография, 2002, №4, с. 730-736.
 [3] Данилов В.И., Гончиков К.В., Зуев Л.Б. Макролокализация пластического течения в монокристаллах цинка, ориентированных для базисного скольжения. // Письма в ЖТФ, 2004, т.30. вып.4, с.71-77.

Расчёт теоретических рентгенограмм графана и анализ возможности его экспериментального обнаружения

Гордина Олеся Сергеевна

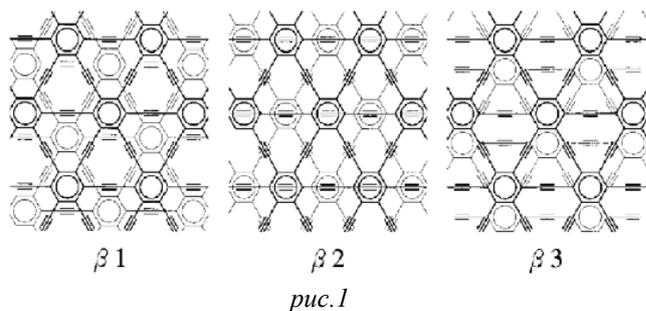
Челябинский государственный университет

Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н

belenkov@csu.ru

В последние десятилетия было открыто множество новых структурных модификаций углерода. Карбин, графит, и алмаз состоят из атомов в состоянии sp , sp^2 и sp^3 -гибридизации соответственно. Новые исследования привели к теоретическому предсказанию возможности

существования новых структурных разновидностей углерода, состоящих из атомов углерода в различных гибридных состояниях. Одна из таких гипотетических структур названная графаном (graphyne) была предсказана в работе [1]. Этот материал должен состоять из слоев углеродных атомов находящихся в состояниях sp и sp^2 -гибридизации [1-4], в отличие от слоев углеродных атомов в графите, которые состоят только из sp^2 -гибридизированных атомов. На основе графана возможно формирование каркасных структур графанофуллеренов [5-7] и графановых нанотрубок [7-9]. Первые успешные шаги в синтезе графана уже сделаны [3]. Для его идентификации необходим теоретический расчет рентгенограмм различных графановых фаз, что и составило цель данной работы.



В качестве структурной модели для расчетов были рассмотрены следующие разновидности графана – графан (см. рис.1) [2], графдиен, графан-3, графан-4, которые отличаются длиной поли-кумуленовых цепочек связывающих гексагоны в слое (цепочки из 2, 4, 6, 8 атомов соответственно). Для каждого из графанов были рассмотрены 4 структурных разновидности, отличающихся расположением соседних

слоев – α , β_1 , β_2 , β_3 (см. рис.1). В α -структуре соседние слои расположены так, что каждый атом одного слоя расположен над атомом другого слоя (чередование слоев в трехмерной структуре ААА). В β -структурах соседние слои сдвинуты друг относительно друга (чередование слоев в трехмерной структуре АВАВ). Для всех структур были определены элементарные ячейки, найдены координаты атомов и рассчитаны теоретические рентгенограммы.

Для сравнительного анализа экспериментально были зафиксированы рентгенограммы углеситала, углеродного депозита, полученного термическим распылением графитовых электродов и содержащего фуллерены и углеродные нанотрубки, и искусственного графита. Экспериментальные съемки и теоретические расчеты выполняли для $Cu K_{\alpha}$ -рентгеновского излучения.

На рис.2 представлены рассчитанные рентгенограммы для α , β_1 , β_2 , β_3 – фаз графана. Аналогичные рентгенограммы для графдиена, графана-3, графана-4. Отличие заключается в том, что с увеличением длины карбиновых цепочек соединяющих гексагоны, увеличивается число дифракционных линий. Однако относительная интенсивность дополнительных линий, как правило, менее интенсивностью менее 1%. Дифракционные максимумы значимой интенсивности (>3-5%), которые могут использоваться для идентификации структурных разновидностей, находятся в диапазоне малых углов дифракции (от 10 до 23°).

Анализ возможности существования графана в искусственном графите, углеситале и углеродных депозитах, проводили в связи с тем, что нередко вновь синтезированные новые структурные разновидности углерода в последствии обнаруживали в широко распространенных углеродных материалах. Анализ экспериментальных рентгенограммами исследованных образцов показало, что ряд дифракционных линий для характерных для графановых фаз совпадает с экспериментальными. Однако в диапазоне малых углов интенсивные дифракционные максимумы, характерные для графановых фаз не наблюдаются. Следовательно, в исследованных образцах, графановые фазы либо отсутствуют, либо их количество составляет менее 1-2%.

Таким образом, в результате проведённых исследований получены теоретические рентгенограммы углеродных фаз графанового ряда, которые можно использовать для их идентификации.

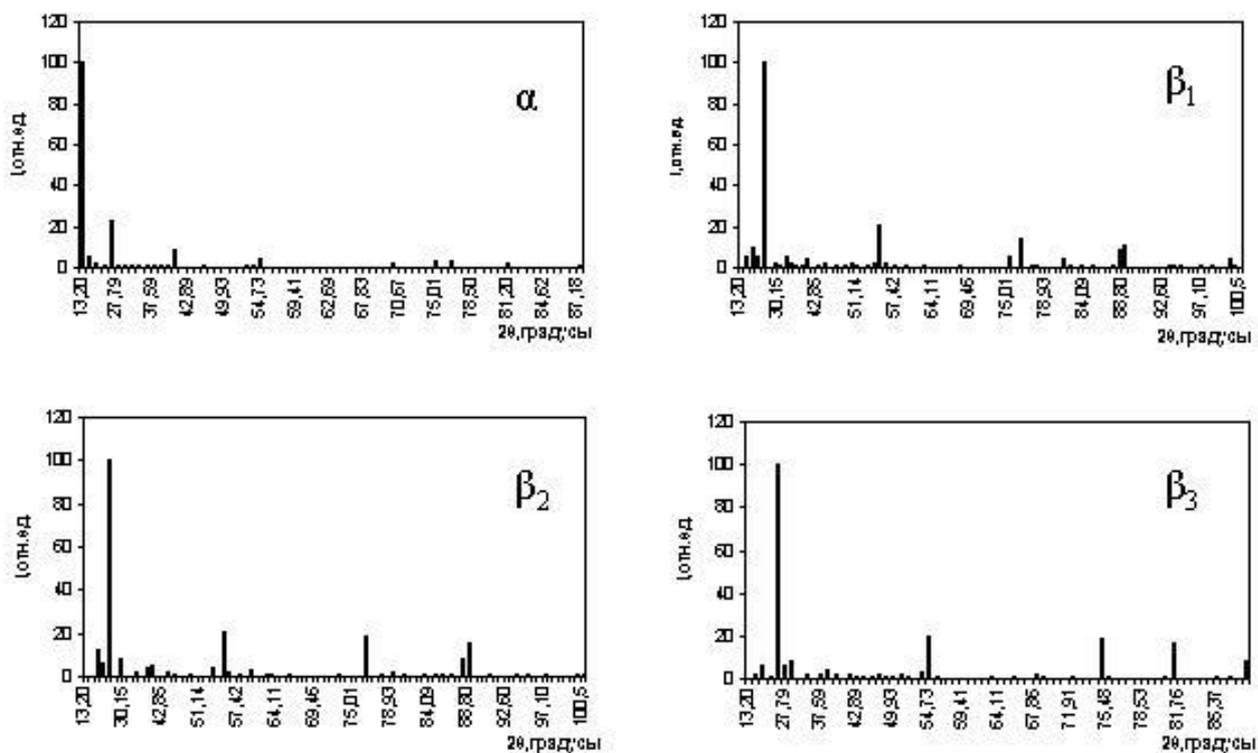


рис. 2

Список публикаций:

- [1] *Baughman R.H., Eckhardt H., Kertesz M., J.Chem.Phys., 87, 6687-6699 (1987).*
- [2] *Narita N., Nagai S., Suzuki S., Nakao K., Phys. Rev. B., 58, 11009-11014 (1998).*
- [3] *Narita N., Nagai S., Suzuki S., Nakao K., Phys. Rev. B., 60, 11146-11151 (2000).*
- [4] *Narita N., Nagai S., Suzuki S., Phys. Rev. B., 64, 245408 (2001).*
- [5] *Baughman R.B., Galvgo D.S., Cui C., Chem. Phys. Lett., 204, 8-13, (1993).*
- [6] *Беленков Е.А., Известия ЧНЦ, №1, 12-16 (2002).*
- [7] *Беленков Е.А., Вестник ОФО РФ, <http://www.uniphys.ru/journal/N1-02/toparticle/toparticle.htm> (2002).*
- [8] *Беленков Е.А., Известия ЧНЦ, №1, 17-21 (2002).*
- [9] *Coluci V.R., Braga S.F., Legoas S.B., Galva D.S., Baughman R.H., Phys. Rev. B., 68, 035430 (2003).*

Влияние пористости на диссипацию механической энергии в пористой меди

Григорьев Григорий Алексеевич

Алтайский Государственный Университет

Поляков Виктор Владимирович, д. ф-м. н

grigorev2003@mail.ru

Применение пористых материалов и сплавов, характеризующихся резко неоднородной структурой и эксплуатируемых в условиях переменных внешних нагрузок, требует знания особенностей диссипации энергии упругих колебаний в зависимости от параметров структуры материала. Такие особенности могут быть эффективно исследованы с помощью метода внутреннего трения. Применение этого метода к изучению релаксационных свойств металлов и сплавов позволяет выявить физические механизмы, ответственные за диссипацию энергии в пористых средах. В настоящей работе исследовано влияние структурных параметров, в частности, интегральной пористости, на величину внутреннего трения в меди.

Измерения внутреннего трения проводились на установке, работающей по принципу обращённого крутильного маятника и позволяющей регистрировать затухание свободных крутильных колебаний образца. Исследования проводились в амплитудонезависимой области при частоте $\nu=50$ Гц в интервале температур от 300 до 800 К. Для уменьшения потерь в результате демпфирования воздухом и избежания окисления поверхности образцов, экспериментальная установка помещалась в вакуумную камеру. Образцы для исследований изготавливались из медного порошка ПМ1 с содержанием меди 99,8 % путём прессования и последующего спекания в вакууме в течение полутора часов при температуре 1100 К и имели вид стержней размером 2х2х65мм. Пористость образцов, вводимая как объёмная доля пустот, изменялась в интервале от 0 до 0,4.

Для выявления механизмов, ответственных за диссипацию энергии в неоднородных средах эффективным является изучение зависимостей температурных релаксационных спектров от параметров структуры материала. На (рис.1) представлены температурные релаксационные спектры меди для пористости $P=0; 0,15; 0,3$.

Как видно из рисунка на всех зависимостях наблюдаются максимумы внутреннего трения, причём максимум А - характеризуется как вызванный зернограничной релаксацией, а максимум В – релаксацией на двойниковых границах. Сравнение релаксационных спектров для образцов с различной пористостью свидетельствует о значительном влиянии пористой структуры на внутреннее трение. При увеличении пористости происходит сдвиг максимумов в сторону более низких температур и уменьшение высоты пика внутреннего трения.

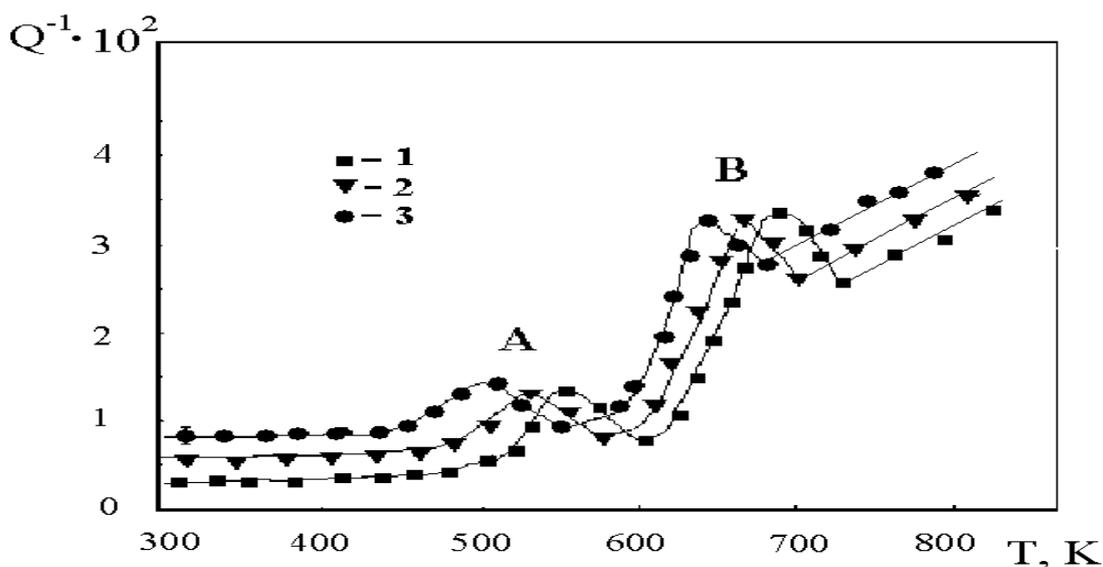


рис.1. Зависимость внутреннего трения меди от температуры.
 1 – $P = 0$; 2 – $P = 0,15$; 3 – $P = 0,3$.

Для выявления конкретных механизмов в процессе релаксации, параметры структуры образцов изменялись с помощью термической и механической обработок. Часть образцов подвергались отжигу, проводившемуся в вакууме при температуре 800К в течение 12ч. Данный режим слабо сказывается на пористой структуре, но приводил к увеличению размеров зёрен, падению плотности тройных стыков и значительному уменьшению числа двойников. К части образцов прошедших отжиг применялся деформационный наклёп. При такой обработке происходило увеличение плотности двойников до исходных значений.

Экспериментальные результаты, полученные в работе и свидетельствующие о существенной роли параметров структуры на внутреннее трение в пористых металлах, могут быть использованы для анализа механизмов диссипации энергии упругих колебаний в металлических материалах, характеризующихся резко неоднородным строением.

Электронная структура квантовой нити кремния в кластерном приближении

Деева Юлия Викторовна

Воронежский государственный университет

Тимошенко Юрий Константинович, к. ф.- м. н

phopt131@main.vsu.ru

В первых расчетах зонной структуры квантовых нитей кремния, сделанных в начале 90-х годов, было обнаружено, что уменьшение квантово-механической размерности приводит к качественному изменению зонной структуры, а именно: непрямозонный полупроводник становится прямозонным. Это обстоятельство позволило дать интерпретацию свечения пористого кремния в видимой области. Однако оказалось, что характеристики этого свечения со временем изменяются. Некоторые исследователи объясняют такую модификацию процессами окисления, в результате которых на поверхности пористого кремния образуются кислородосодержащие комплексы. До сих пор расчеты зонной структуры и спектров поглощения квантовых нитей проводились с использованием трансляционно-инвариантной модели, то есть обычного зонного подхода, что не позволяет адекватным образом

рассматривать точечные дефекты. Исследование электронной структуры точечных дефектов и, в частности, кислородосодержащих комплексов в квантовых нитях можно провести с использованием кластерных подходов. Обе указанные модели имеют свои плюсы и свои минусы, поэтому для получения информации об электронной структуре наиболее оптимальным вариантом является сочетание обоих подходов. В данной работе используется кластерный подход применительно к квантовой нити кремния с целью определения такого размера кластера, который позволил бы достаточно корректно описывать свойства квантового провода.

Для построения исходной пространственной модели использовалась топология квантовой нити из работы [1], то есть нить квадратного сечения, ориентированная вдоль направления [001]. Квадратное сечение имеет размеры $3a_0 \times 3a_0 \times 8a$, где $a=5.4307 \text{ \AA}$, $a_0 = a/\sqrt{2}$, a – постоянная решетки. Оборванные связи кремния на поверхности нити насыщались водородом. Расстояние между атомами кремния в элементарной ячейке 2.3521 \AA . Расстояние между атомами кремния и водорода 1.4918 \AA .

Для расчета электронной структуры кластера использовалось приближение сильной связи в варианте Слейтера – Костера, так как этот же метод применялся в [1]. В базисный набор включались $3s$ и $3p$ орбитали кремния и $1s$ орбиталь водорода. Взаимодействие учитывалось до вторых соседей включительно. Такой валентный базис требует знания двенадцати параметров Слейтера – Костера, численные значения которых были взяты из работы [2]. Рассматривались кластеры различных размеров, самый большой из которых содержал 209 атомов кремния и 196 атомов водорода. Количество базисных атомных орбиталей для такого кластера равно 1032. Одноэлектронные энергии и орбитальные коэффициенты разложения кластерной орбитали по атомным орбиталям находились непосредственным вычислением собственных значений и собственных векторов матрицы гамильтониана.

Были рассчитаны полная и локальная плотности состояний. Полная плотность состояний кластера размыта по гауссовым функциям с дисперсией 0.25 эВ (рис. 1). Из этого рисунка видно, что, как и в работе [1], наблюдается провал уровней валентных состояний относительно потолка валентной зоны, совмещенного с нулем энергетической шкалы. В плотности валентных состояний чувствуется трехгорбая структура, характерная для кристалла кремния. Она сохраняется и в случае квантовой нити с некоторыми модификациями. Оказалось, что качественно подобные результаты появляются уже для кластера $\text{Si}_{109}\text{H}_{116}$. Таким образом, при рассмотрении кластеров, содержащих порядка 100 атомов кремния, можно получить результаты для плотности состояний, качественно адекватные зонному приближению.

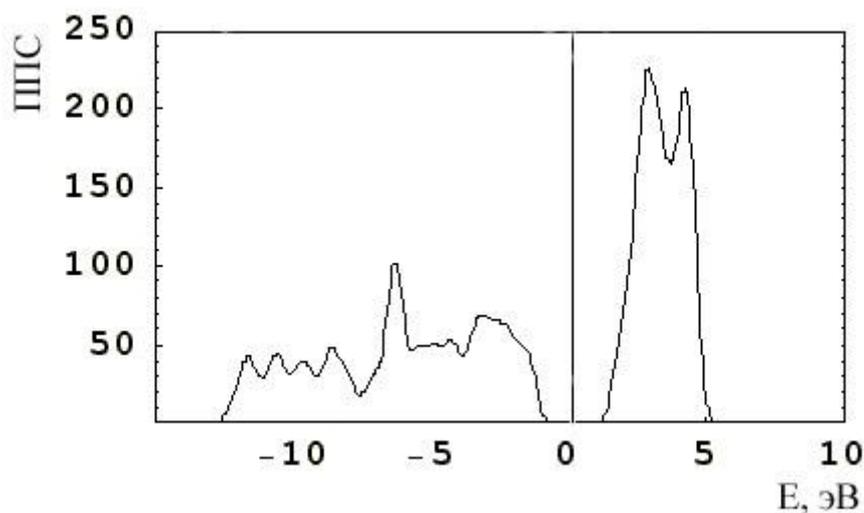


рис.1. Полная плотность электронных состояний $\text{Si}_{209}\text{H}_{196}$.

Методом Слейтера – Костера расчет равновесной конфигурации квантовой нити выполнить невозможно, так как это по сути интерполяционный метод. Для решения этой задачи необходимо использовать квантово-химические методы. Так как размер кластера порядка 10^2 атомов, приходится применять полуэмпирические квантово-химические методы расчета. Для оптимизации геометрии кластера $\text{Si}_{109}\text{H}_{116}$ использовались полуэмпирические методы MINDO/3, MNDO, AM1, PM3. Эти методики предполагается в дальнейшем использовать для исследования кислородосодержащих комплексов на поверхности квантовых нитей кремния.

Список публикаций:

[1]. Копеев Ю.В., Молотков С.Н., Назин С.С. Размерный эффект в квантовых проводах кремния // Письма в ЖЭТФ, 1992, том 55, вып.12, с. 696-700.

[2]. Верзунова В.В., Смерек С.А., Тимошенко Ю.К. Электронная структура квантовой нити кремния с упорядоченными вакансиями. // Конденсированные среды и межфазные границы. 2002, том 4, № 3, с. 192 – 194.

Влияния концентрации межузельных атомов на структурное разупорядочение ГЦК металлов

Дейч Денис Борисович

Евтеев Александр Викторович, Косилов Александр Тимофеевич

Воронежский государственный технический университет

Косилов Александр Тимофеевич, д.ф.-м.н

mfm@ns1.vstu.ac.ru

Формирование аморфного состояния путем создания предельных концентраций межузельных атомов в кристалле [1] обладает одной привлекательной особенностью – возможностью анализа структурного состояния системы на уровне ближнего и дальнего порядков в области концентраций, непосредственно предшествующих аморфизации. Данные исследования, проводимые в рамках компьютерного моделирования моделирования, имеют реальную перспективу раскрыть закономерности эволюции структуры ближнего упорядочения при увеличении концентрации атомов внедрения вплоть до критической и в конечном итоге сформулировать фундаментальные основы структурной организации аморфных металлических систем.

В настоящей работе методом статической релаксации изучено изменение внутренней энергии системы и структуры ближнего порядка при увеличении концентрации межузельных атомов в ГЦК меди вплоть до аморфизации системы.

Для формирования исходного состояния атомы внедрения случайным образом размещали в октаэдрических порах модели идеального ГЦК кристалла меди, содержащей 4000 атомов в расчетной ячейки с периодическими граничными условиями. Число атомов внедрения изменялось от 1 до 600 внедренных атомов (0.025÷13.04 %). Для уменьшения их концентрации были также построены модели с 5324, 6912 и 8788 атомами в узлах кристаллической решетки и по одному внедренному атому (0.0188, 0.0145 и 0.0114 %) Далее проводилась статическая релаксация модели. Межатомное взаимодействие в системе рассчитывали в рамках метода погруженного атома [1].

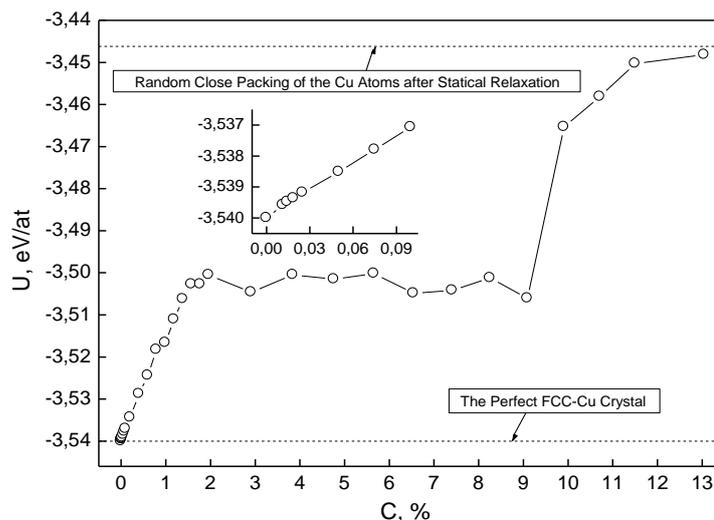


рис.1

На рисунке 1, приведена зависимость внутренней энергии системы от концентрации атомов внедрения. При увеличении концентрации до ~1.6% наблюдается рост внутренней энергии системы, энергия образования атомов внедрения при этом уменьшается от ~3.5 эВ/ат до ~2.3 эВ/ат. Анализ парной функции радиального распределения атомов (ПФРРА) модели показывает, что расположение атомов в системе соответствует дефектному ГЦК кристаллу меди. Дальнейшее увеличение концентрации внедренных атомов вплоть до ~9 % не приводит к изменению внутренней энергии и ПФРРА модельной системы. При ~10 % происходит структурное разупорядочение модели, сопровождающееся исчезновением дальнего порядка и одновременным появлением в системе атомов с икосаэдрической координацией.

Таким образом, при увеличении концентрации атомов внедрения до ~1.6 % энергия системы монотонно растет, что свидетельствует об отсутствии радикальной перестройки структуры. В интервале концентраций ~1.6÷9 % происходит перестройка структуры ближнего порядка практически без изменения внутренней энергии системы. При дальнейшем увеличении концентрации атомов внедрения происходит переход в аморфное состояние.

Список публикаций:

- [1] Granato AV. // *Phys. Rev. Lett.* 1992, V.68. №7. P.974.
 [2] Дмитриев А.А., Евтеев А.В., Косилов А.Т. // *Поверхность.* 2003. №5. С.74.

Структура и свойства тройной системы твердых растворов PbTiO_3 - PbZrO_3 - $\text{PbNb}_{1/2}\text{Bi}_{2/3}\text{O}_3$

Демченко Олеся Александровна

Ростовский государственный университет

Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н., Турик Анатолий Васильевич, д.ф.-м.н.
olesia_demch@mail.ru

Появившиеся в последнее время публикации (см., например, обзор [1] и ссылки в нем), свидетельствующие о более сложной, чем было принято, морфологии области морфотропного перехода, делают необходимым детальное рассмотрение внутри нее поведения структурных, пьезоэлектрических и диэлектрических характеристик твердых растворов системы $0,98\text{Pb}(\text{Ti}_x\text{Zr}_{1-x})\text{O}_3$ - $0,02\text{Pb}(\text{Nb}_{1/2}\text{Bi}_{1/2})\text{O}_3$.

Зависимость структурных характеристик образцов, полученных при оптимальной температуре $T_{\text{сн.}} = 1200 \text{ }^\circ\text{C}$, от x приведена на рис. 1 (а). Обращает на себя внимание факт их немонотонного поведения внутри области морфотропного перехода (ОМП). Так, выделяются два участка постоянства (или очень малых изменений) параметров элементарной ячейки в периферийных частях ОМП ($0.455 < x < 0.465$; $0.47 < x < 0.48$), примыкающих или близко расположенных к границам перехода в однофазные (тетрагональные (Т) или ромбоэдрические (Rh)) состояния, а также центральная часть ($0.465 < x < 0.47$), где параметры изменяются резко. Примерно также ведут себя параметры $\mu_{\text{Rh}}(x)$ и $\mu_{\text{T}}(x)$, характеризующие, соответственно, содержание Rh- и Т-фаз; содержание псевдокубической (PSC) фазы, наоборот, постоянно в центре ОМП и экстремально изменяется вблизи морфотропных границ, образуя максимумы на участках постоянства параметров ячеек.

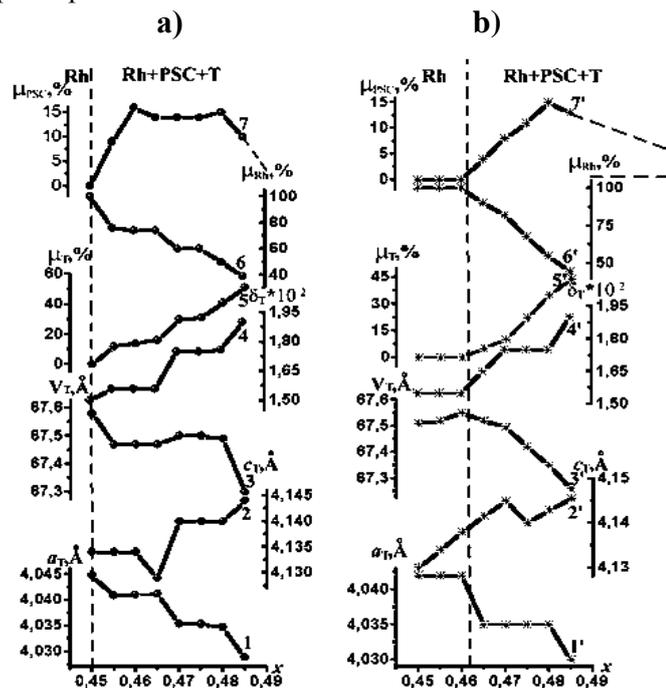


Рис.1 Концентрационные зависимости структурных характеристик TP системы $0,98\text{Pb}(\text{Ti}_x\text{Zr}_{1-x})\text{O}_3-0,02\text{Pb}(\text{Nb}_{1/2}\text{Bi}_{1/2})\text{O}_3$, полученных при $T_{\text{сн.}} = 1200 \text{ }^\circ\text{C}$ (а); $T_{\text{сн.}} = 1180 \text{ }^\circ\text{C}$ (б) (a_{T} (1, 1), c_{T} (2, 2) – параметры; V_{T} (3, 3') – объем; δ_{T} (4, 4') – однородный параметр деформации Т-ячейки; μ_{T} (5, 5'), μ_{Rh} (6, 6'), μ_{PSC} (7, 7') – процентное содержание Т, PSC, Rh фаз).

с), свидетельствует о воспроизведении в целом установленных выше закономерностей. Основными отличиями является сдвиг в сторону PbTiO_3 и расширение почти в полтора раза ОМП: $\Delta x \approx 0.058$ ($0.462 < x < 0.520$) смещение в однофазную область Rh первого участка постоянства структурных параметров; резкие изменения внутри ОМП $\mu_{\text{PSC}}(x)$, $\mu_{\text{Rh}}(x)$, $\mu_{\text{T}}(x)$; отсутствие сформировавшегося максимума $\mu_{\text{PSC}}(x)$ на Rh границе.

Изучены зависимости от температуры диэлектрической проницаемости ϵ , проводимости G , тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta$ в интервале $20 - 450 \text{ }^\circ\text{C}$. Полученные экспериментальные данные позволили определить температуру $T_{\text{с}}$ максимума диэлектрической проницаемости $\epsilon_{\text{м}}$ (температуру фазового перехода); температуру T_0 и постоянную C_{w} Кюри – Вейсса, найденные графическим путем из зависимости $1/\epsilon(T)$. Для описания ϵ выше температуры фазового перехода использовалось выражение $\epsilon(T) = C_{\text{w}}(T-T_0)^{-1}$.

Во всех изученных системах установлено немонотонное изменение фундаментальных параметров сегнетоэлектриков ($T_{\text{с}}-T_0$, C_{w} , $\epsilon_{\text{м}}$) в ОМП (рис 2.).

Наблюдаемое связывается с возникновением в ОМП промежуточной псевдокубической фазы.

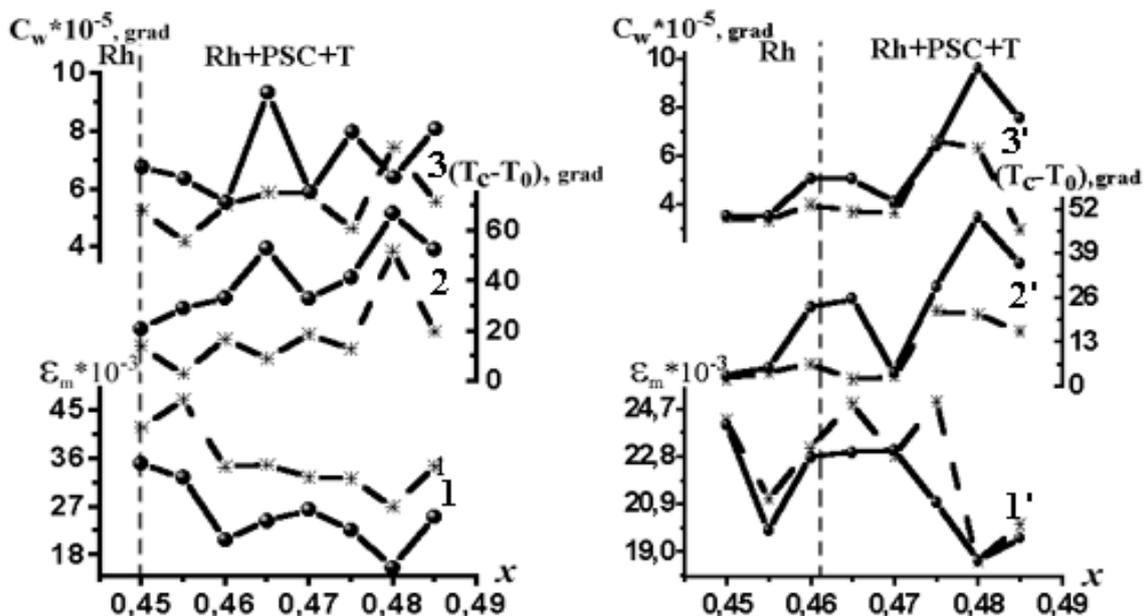


рис. 2

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 02-02-17781)

Список публикаций:

[1] Noheda B. // *Current Opinion in Solid State & Materials Science*. 2002. V.6. P.27.

Особенности поведения низкочастотных упругих и неупругих свойств релаксорного сегнетоэлектрика $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ в области размытого фазового перехода

Дядькин Вадим Александрович

Воронежский Государственный Технический Университет

Иванов Олег Николаевич, д.ф.-м.н

fripp@voronezh.net

Одним из характерных признаков релаксорного поведения сегнетоэлектриков является наличие размытого фазового перехода. Для объяснения особенностей физических свойств релаксоров были предложены несколько моделей (модель флуктуаций состава, модель композиционного упорядочения, модель случайных полей и т.д); в основе большинства моделей лежит представление о существовании в релаксорах случайным образом ориентированных полярных кластеров в неполярной параэлектрической матрице. Наличие кластерной структуры проявляется в поведении таких физических свойств релаксоров как диэлектрические, оптические, электромеханические свойства и т.д. Можно предположить, что и упругие и неупругие свойства, будучи структурно-чувствительными свойствами твердых тел, окажутся чувствительными к наличию кластерной структуры релаксоров.

Целью настоящей работы явилось обнаружение и изучение особенностей низкочастотных упругих (сдвиговая упругая податливость S) и неупругих (внутреннее трение

Q^{-1}) свойств модельного релаксорного сегнетоэлектрика $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ в области размытого фазового перехода.

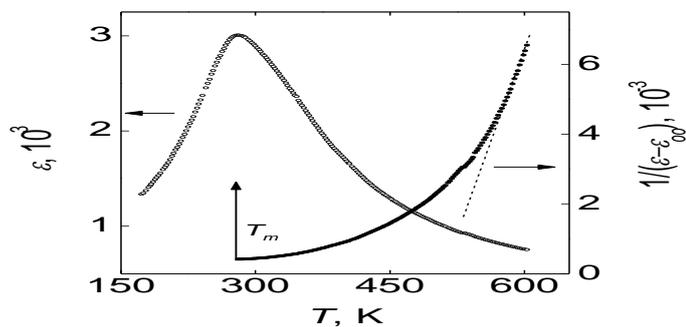


Рис. 1

Исследованные образцы $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$ были приготовлены по двухстадийной керамической технологии. Измерения S и Q^{-1} проведены с помощью установки на основе обратного крутильного маятника (частота ~ 10 Гц и амплитуда деформации $\sim 10^{-4}$). Для идентификации особенностей упругих и неупругих свойств, обусловленных существованием размытого фазового перехода, были также исследованы диэлектрические свойства образцов (диэлектрическая проницаемость ε и диэлектрические потери $\text{tg}\delta$, измерительная частота 1 МГц).

Для определения температурной области реализации размытого фазового перехода были исследованы диэлектрические свойства образца $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$. Температурная зависимость ε представляет собой широкий максимум с наибольшим значением ε при температуре $T_m=281$ К (рис.1). Анализ зависимости $\varepsilon(T)$, выполненный на основе термодинамического описания собственных сегнетоэлектрических фазовых переходов, показал, что во всем интервале температур от T_m до 600 К (максимальная использованная в эксперименте температура) зависимость $\varepsilon(T)$ не подчиняется линейному закону Кюри-Вейсса, что свидетельствует о существовании в исследуемом образце размытого фазового перехода. В интервале от T_m до $T^*=460$ температурная зависимость диэлектрической проницаемости хорошо описывается квадратичным законом Кюри-Вейсса. На основе экспериментальных данных в рамках модели флуктуаций состава была сделана оценка степени размытия фазового перехода (~ 65 К).

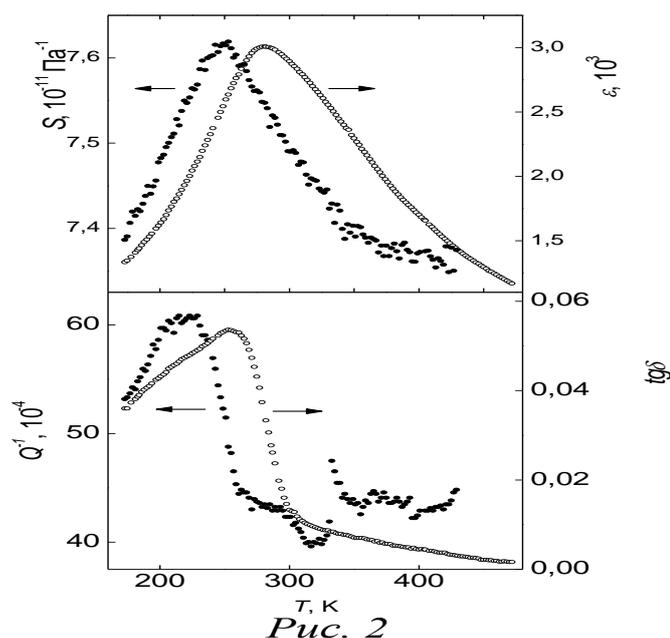


Рис. 2

Результаты исследования упругих и неупругих свойств образца в области размытого фазового перехода ниже температуры T^* представлены на рис.2. На этом же рисунке показано изменение диэлектрических свойств. Видно, что температурные зависимости ϵ и S качественно очень похожи: обе зависимости представляют собой довольно широкие максимумы, но зависимость $S(T)$ смещена в сторону низких температур, так что максимум на кривой $\epsilon(T)$ наблюдается при температуре $T_m=280$ К, а максимум на кривой $S(T)$ – при температуре $T_{ms}=250$ К. Диэлектрические потери $\text{tg}\delta$ и внутреннее трение Q^{-1} также показывают идентичное температурное поведение при охлаждении ниже температуры T^* : обе величины слабо зависят от температуры до T_m (для диэлектрических потерь) или до T_{ms} (для упругой податливости), при дальнейшем охлаждении $\text{tg}\delta$ и Q^{-1} возрастают, проходят через максимумы при $T \approx 250$ К ($\text{tg}\delta$) и $T \approx 225$ К (S), и затем постепенно уменьшаются. Такое поведение диэлектрических потерь может быть связано с появлением при охлаждении ниже T_m доменного вклада, который обусловлен формированием сегнетоэлектрической доменной структуры в полярных кластерах. В рамках флуктуационного механизма низкочастотного внутреннего трения при фазовых переходах первого рода, были сделаны оценки размера полярных кластеров (~ 1000 Å).

Таким образом, установлена корреляция в поведении низкочастотных упругих и неупругих свойств, с одной стороны, и диэлектрических свойств, с другой, в области размытого фазового перехода ниже температуры T^* в керамических образцах $\text{PbMg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3}\text{O}_3$.

Диссипация энергии при динамическом наноиндентировании твердых тел

Ефимченко Вадим Сергеевич

Хлебников Владимир Викторович

Тамбовский Государственный Университет имени Г. Р. Державина

Тюрин Александр Иванович, к. ф-м. н

tyurin@tsu.tmb.ru

Один из наиболее простых способов определения механических свойств твердых тел в микро - и нанообъемах заключается во вдавливании жесткого индентора и последующем вычислении величины твердости H как отношение усилия внедрения P к площади поверхности образовавшегося отпечатка A_c . Однако при этом как в традиционном индентировании, так и в наноиндентировании, фактически оцениваются квазистатические упругопластические свойства материала в тонких приповерхностных слоях. Величина H определенная таким образом не отражает динамические свойства материала или кинетические характеристики каких-либо определенных физических процессов в нем.

Вместе с тем во многих случаях эксплуатационные возможности, поведение и природа разнообразных вторичных процессов при кратковременном контактом взаимодействии определяются именно динамикой структурных дефектов и пластического течения в зоне контакта, а также величиной энергии поглощенной при внедрении индентора. При этом условия кратковременного локального взаимодействия реализуются не только при индентировании, но и во многих других практически важных случаях: абразивном износе трущихся твердых тел, соударение мелких, быстро летящих частиц с поверхностью, дроблении и тонком помоле, механическом сплавлении, в кончике быстро растущей трещины при квазихрупком разрушении и т. д.

При этом энергетические аспекты микро- и наноконтактной деформации могут играть определяющую роль для понимания микромеханизмов и энергетики происходящих физических процессов.

Однако отсутствие стандартной аппаратуры и разработанных методик до сих пор не позволяет провести исследование диссипации энергии при действии высоких локальных напряжений.

Поэтому целью работы являлось установление зависимости удельной поглощенной энергии W от глубины пластического отпечатка h_c и от скорости относительной деформации $\dot{\epsilon}$.

В работе описан способ, позволяющий определить зависимость W от h_c и $\dot{\epsilon}$. Работа проводилась на динамическом наноиндентометре разработанном и созданном научным коллективом ТГУ со следующими характеристиками: временное разрешение 100 мкс, пространственное разрешение 1 нм. Эксперимент проводился при комнатной температуре на кристаллах LiF. Индентирование осуществлялось алмазной пирамидой Берковича импульсом силы прямоугольной формы с варьируемой амплитудой от 3мН до 160мН и длительностью импульса нагрузки от 2 мс до 1 с.

Были получены следующие результаты. Значения удельной поглощенной энергии остаются постоянными в интервале h_c от единиц микрометров до 500нм, а при $h_c < 500$ нм резко возрастает и при $h_c = 50$ нм достигает значения 47нДж/мкм³ (рис.1).

Показано влияние скорости относительной деформации $\dot{\epsilon}$ на величину W . При этом в диапазоне скоростей относительной деформации $\dot{\epsilon}$ от 10^{-2} с^{-1} до 55 с^{-1} значение W не меняется. При $\dot{\epsilon}$ от $5 \cdot 10^1 \text{ с}^{-1}$ до $2.5 \cdot 10^2 \text{ с}^{-1}$ значение W увеличивается при увеличении $\dot{\epsilon}$ и при значении

$\dot{\epsilon}=2.5 \cdot 10^2 \text{ с}^{-1}$ достигает значения 47 нДж/мкм^3 . Это может свидетельствовать о смене механизмов массопереноса на ранних стадиях формирования отпечатка.

Таким образом, в работе показано, что удельная поглощённая энергия зависит от глубины пластического отпечатка h_c (масштабный фактор), и от скорости относительной деформации $\dot{\epsilon}$ (скоростной фактор).

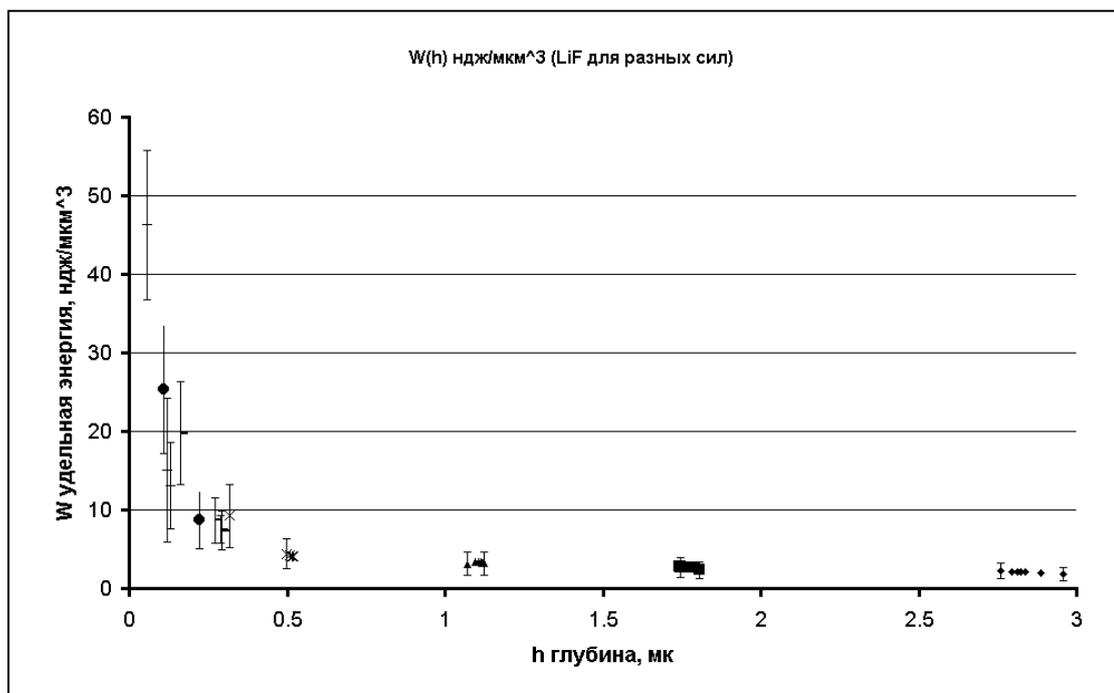


рис.1

Молекулярно-динамическое моделирование процессов формирования и эволюции дефектной структуры пленочной гетеросистемы Cu/Ni(001)

Жиляков Дмитрий Геннадьевич

Евтеев Александр Викторович, Михайлов Евгений Александрович

Воронежский Государственный Технический Университет

Косилов Александр Тимофеевич, д.ф-м.н

dimitrihouse@mail.ru

В данной работе в рамках метода молекулярной динамики (МД) проведено моделирование ориентированной кристаллизации аморфной в исходном состоянии пленки Cu на поверхности монокристаллической подложки Ni (001), изучены закономерности эволюции образовавшейся гетероструктуры в процессе изохронного отжига. Размерное несоответствие параметров кристаллических решеток Cu и Ni составляет ~2.7%. Подложка моделировалась с помощью расчетной ячейки, состоящей из 8 атомных слоев, в каждом из которых находилось 900 атомов. В направлениях [110] и $[1\bar{1}0]$ на систему накладывались периодические граничные условия. Три нижних слоя являлись статическими, пять последующих – динамическими. Для формирования аморфной пленки Cu на поверхности подложки случайным образом размещали 9500 атомов, после чего проводилась статическая релаксация системы. Далее атомам Cu и

атомам Ni в динамических слоях сообщались начальные скорости в соответствии с распределением Максвелла при температуре 20 К, и производился изохронный нагрев системы методом МД с шагом 20 К. Продолжительность МД-отжига при каждой температуре составляла 3×10^{-11} с. Методика МД расчета состояла в численном интегрировании уравнений движения атомов с временным шагом 1.5×10^{-15} с по алгоритму Верле. Межатомное взаимодействие в системе рассчитывалось в рамках метода погруженного атома.

По результатам работы можно сделать следующие выводы.

1. Пленка при 20 К имела ГЦК структуру, параллельную ориентацию: (001), [110] Cu || (001), [110] Ni и тетрагональные искажения (средняя величина $c/a \approx 1,037$).

2. В плоскостях {111} пленки обнаружены дефекты упаковки, выходящие на поверхность и ограниченные в объеме либо дислокациями Шокли с векторами Бюргерса $(a/6)\langle 112 \rangle$, либо вершинными дислокациями с векторами Бюргерса $(a/3)\langle 110 \rangle$.

3. Обнаружена неустойчивость дислокаций Шокли, ограничивающих дефекты упаковки в объеме пленки. Как правило, процесс перемещения такой дислокации в плоскости скольжения заканчивается образованием вершинной дислокации и новой дислокации Шокли, расположенной в смежной плоскости скольжения. При этом ни одной дислокации непосредственно на когерентной границе раздела фаз не обнаружено.

4. Плотность вершинных дислокаций и дислокаций Шокли, обеспечивающих в пленке аккомодацию упругих напряжений, которые вызваны размерным несоответствием, увеличивается по мере удаления от межфазной границы.

5. Среднее межатомное расстояние в плоскости (001) пленки по мере удаления от границы раздела фаз увеличивается от 2.50 Å – в первом слое до 2.56 Å – в десятом слое (межатомные расстояния для монокристаллов Ni и Cu равны соответственно 2.49 Å и 2.56 Å).

6. При температурах выше 480 К наблюдается интенсивная перестройка дефектной структуры пленки под действием внутренних напряжений, которая сводится к процессам расщепления вершинных дислокаций, аннигиляции или фронтальному перемещению дефектов упаковки путем скольжения дислокаций Шокли и образованию новых вершинных дислокаций на разных расстояниях от межфазной границы.

Кинетический фазовый переход при кристаллизации

Иванов Иван Алексеевич

Дуб Алексей Владимирович

Московский Институт Стали и Сплавов

Дуб Алексей Владимирович

ia_ivanov@mail.ru

В результате развития теории затвердевания установлено, что этот процесс протекает в условиях далеких от равновесия. В рамках этих представлений слой, расположенный непосредственно на границе расплав - твердая фаза, является открытой системой, обменивающейся энергией и веществом с окружающей средой, а процессы, происходящие в нем, должны определяться не принципом достижения минимума свободной энергии, а принципом минимума производства энтропии (принципом Пригожина–Гленсдорфа). При затвердевании вещества на микроуровне следует рассматривать три зоны: затвердевшего вещества, межфазную, в которой металл находится в особом состоянии - виде кластеров, и жидкую [1]. Наиболее эффективным методом изучения поведения подобных систем является

имитационное математическое моделирование, критерием достоверности которого являются внешнее сходство моделируемых структур с реальными.

Существуют модели, изначально построенные на классических представлениях о последовательности присоединений, например, модель направленной кристаллизации, описанная в работе В. Т. Борисова [2]. Однако в этой модели введено ограничение, по которому фронт затвердевания является условно плоским, то есть, присоединение частиц возможно только нормально к поверхности раздела (сверху).

В настоящей имитационной математической модели мы рассмотрели обмен только между кристаллизационным слоем и твердой фазой. Рассматриваемая модель отличается от моделей ДОА, случайного дождя и др. тем, что мы рассматриваем за один шаг взаимодействие ансамбля частиц, т.е. учитываем состав и теплофизические свойства среды вокруг данной частицы [3]. Соответственно, приняты следующие положения и ограничения:

1. Рассматриваем трехмерный массив размером $M \times N \times K$ частиц по осям X, Y и Z соответственно. В представленном варианте - $60 \times 20 \times 120$ частиц. Условная форма кластеров квадратная. Края модели вдоль осей X и Y закольцованы друг на друга.

2. Расплав представлен как 2-х компонентный раствор C-B, и, следовательно, в узлах сетки могут находиться кластеры 2-х различных типов.

Индивидуальные свойства кластеров каждого типа определяются интегральным параметром – коэффициентом аккомодации, который согласно [4] равен: $A = \exp\left(\frac{Q_{пл}}{RT_{пл}}\right)$. Этот

показатель отражает индивидуальные особенности вещества и его поведение при кристаллизации ($Q_{пл}$ - теплота плавления компонента, $T_{пл}$ – температура плавления). В случае затвердевания многокомпонентного расплава (C-B) коэффициент аккомодации элемента примеси (B) будет оказывать влияние на кристаллизацию расплава в целом тем больше, чем сильнее отличается его коэффициент аккомодации от коэффициента аккомодации элемента основы (C)[5]: $\Delta A^{C-B} = |A^C - A^B|$, где A^C, A^B – коэффициенты аккомодации элементов основы и примеси, соответственно.

3. В модели задаются температуры жидкой и твердой фаз. Температура в любой другой точке рассчитывается по линейному закону, причем градиент температуры направлен вдоль оси Z.

4. На поверхности фронта кристаллизации средняя температура равна температуре затвердевания вещества.

5. Аналогом влияния состава на температуру ликвидус локальной области в зависимости от содержания в ней частиц примеси является обратная экспоненциальная зависимость вероятности присоединения примеси от температуры. Таким образом, примесь, кристаллизуясь при более низкой температуре, может вытесняться основным компонентом от фронта.

6. Внешние условия охлаждения, определяющие скорость кристаллизации, задаются числом кластеров, переходящих из жидкого состояния в твердое за один цикл.

7. Вероятность элементарного события (переход кластера в твердое состояние) зависит от градиента температуры, от индивидуальных свойств кластера, от состояния окружающих кластеров и от направления теплоотвода.

8. При переходе от одной частицы к области (группа частиц) меняются локальные теплофизические характеристики этой области, в частности температура затвердевания.

9. Все элементарные процессы описываются соответствующими вероятностями и считаются независимыми.

В общем случае вероятность жидкого кластера перейти в твердое состояние может быть определена: $W = \Delta A \cdot \alpha(\Theta) \cdot \beta(V) \cdot \chi(T) \cdot \delta(n)$, где ΔA – относительный коэффициент аккомодации; функция α характеризует зависимость вероятности перехода кластера в твердое состояние от направления теплоотода Θ ; функция β определяет зависимость перехода от скорости кластера. χ – зависимость вероятности от градиента температуры; δ определяет взаимодействие кластера с окружающей его средой, например, зависимость от состояния среды вокруг данного кластера. Варьируя вид функций α , β , χ , δ можно менять вероятность перехода кластера из жидкого состояния в твердое, и, тем самым, влиять на структуру фронта. В ходе разработки модели, был выбран следующий набор функций: $\alpha = 1$, $\beta = V^2$, $\chi = e^{-kt}$ (k – константа) и $\delta = n$ (n – число затвердевших соседей в первом круге вокруг данного кластера). Кроме того, учитывалась обратно пропорциональная экспоненциальная зависимость вероятности присоединения от разности температуры затвердевания и локальной температуры кластера (исходя из термодинамической теории). В соответствии с основными предположениями модели, считаем, что чем больше закристаллизовавшихся соседей, тем выше вероятность перехода кластера в твердую фазу, при этом вероятность присоединения линейно зависит от количества твердых соседей.

Результаты. Разработана трехмерная модель, позволяющая воспроизводить кристаллизационную структуру и анализировать влияние на ее характеристик как внешних факторов (скорость затвердевания), так и индивидуальных свойств компонентов. Анализ данных моделирования позволяет выявить следующие тенденции:

1. Учет направления теплоотода и различных локальных условий в зоне присоединения приводит к увеличению шероховатости поверхности и удлинению поверхности раздела (т.е. увеличению фрактальной размерности образовавшихся структур).
2. Увеличение разности температур ΔT_{max} приводит к уменьшению шероховатости поверхности раздела.
3. Плавное изменение параметров, характеризующих индивидуальные свойства элемента-примеси, а также условия затвердевания, приводят к резкому изменению вида моделируемых структур.

Список публикаций:

- [1] Пригожин И., *От существующего к возникающему*, М.: Наука, 326 (1985)
- [2] Борисов В.Т., *Теория двухфазной зоны металлического слитка*, М.: Металлургия (1987)
- [3] Дуб В.С., Копелиович Д.Д., Панкратов О.С., Дуб А.В. Роль вероятностных процессов в формировании структуры при затвердевании, // *Сталь*, №10, 28-32 (1990)
- [4] Чалмерс Б. *Теория затвердевания*, М.: Металлургия (1968)
- [5] Дуб В.С., Макарычева Е.В., Колтишон Э.Ю., Дуб А.В. Влияние кремния и марганца на воздействие фосфора в сталях для крупных поковок // *Современные проблемы металлургического производства. Сборник трудов международной научно-практической конференции*. Волгоград., РПК «Политехник» 300-304 (2002)

Применение статистической динамической теории дифракции для исследования ионо-имплантированных слоев кристаллов в условиях стоячих рентгеновских волн

Казаков Дмитрий Витальевич

Сыктывкарский государственный университет, Сыктывкар

Пунегов Василий Ильич, д. ф-м.н

kazakov@syktsu.ru

В рамках статистической динамической теории решена задача дифракции на слоисто-неоднородных кристаллах с учетом диффузного рассеяния. Основываясь на численных расчетах, рассмотрено влияние когерентно и диффузно рассеянного рентгеновского излучения на возбуждение вторичных процессов в условиях стоячей рентгеновской волны. Исследовались кристаллы с нарушенным приповерхностным слоем в результате ионной имплантации. Применялся подход, в рамках которого нарушенный слой представлял собой многослойную структуру. В пределах каждого слоя его структурные характеристики считались постоянными ($\Delta d/d$ - относительная деформация, f – статический фактор Дебая-Валлера, размер дефекта). В основе вычислений применялся метод рекуррентных соотношений для амплитудных коэффициентов отражения.

Теоретические расчеты сравнивались с экспериментальными измерениями дифракции на ионно-имплантированной (Fe^+ , энергия $E=200$ кэВ, доза $D=5 \cdot 10^{12}$ ион/см²) структуре *InP*. Для анализа результатов построена теоретическая модель. В процессе исследования определены основные структурные характеристики нарушенного слоя; показано влияние диффузной составляющей интенсивности рассеяния на угловое распределение отражения и фотоэлектронной эмиссии. Проводится сравнение с результатами когерентного приближения.

По результатам проведенной работы можно заключить следующее:

1. Результаты когерентного приближения решительным образом отличаются от результатов, проведенных с учетом диффузного рассеяния.
2. Учет диффузного рассеяния приводит к «поднятию» и «сглаживанию» кривых выхода вторичных процессов и коэффициента дифракционного отражения.
3. Кривые выхода вторичных процессов показали высокую чувствительность к фазе отраженной волны.
4. Размеры дефектов оказывают существенное влияние на ширину «хвостов» кривых выхода вторичных процессов и коэффициента дифракционного отражения.
5. При уменьшении статического фактора Дебая-Валлера увеличивается влияние диффузной компоненты.
6. При достаточно малых значениях статического фактора Дебая-Валлера кривые выхода вторичных процессов и коэффициента дифракционного отражения обусловлены в основном интенсивностью диффузного рассеяния.

Изготовление и свойства гетероструктур на основе оксида цинка.

Казимагомедов Рустам Муртузалиевич
Дагестанский Государственный Университет
Рабаданов Рабадан Абдулкадырович, д.ф-м.н
aytaumahi@mail.ru

Оксид цинка обладает различными свойствами и на его основе могут быть изготовлены структуры типа полупроводник –полупроводник, металл – полупроводник. Их электрические люминесцентные свойства могут быть использованы в качестве выпрямляющих систем, фотоприемников, источников излучения, преобразователей энергии и другие. Кроме того оксид цинка обладает сильными пьезоэлектрическим и пьезо – оптическими эффектами, что позволяет их использовать на акусто - электрических и акусто – оптических устройствах

Необходимым условием изготовления таких активных структур является разработка управляемой технологии нанесения оксида цинка на другие полупроводники с n – и p – типом проводимости.

В качестве такой технологии подходит метод ионно – плазменного распыления керамики ZnO с поверхности оксидально симметричного магнетрона. Индукция магнетронного поля у поверхности мишени толщины 2 – 4 мм и диаметром до 40 мм составляет 0,01 – 0,1 Тл. Расстояние между мишенью и подложкой не превышает 40 – 50 мм. Печь подложки относительно нормали к распыляемой мишени может быть наклонена до 45⁰, температура подложки изменена от 50 до 400⁰С.

В системе в качестве рабочего газа используется сухой молекулярный кислород.

Давление его в системе регулируется от 5·10⁻² до 10⁻³ мм рт. столба вентилем напуска газа и системой дросселирования вакуума.

Для питания распылительной системы требуется выпрямитель, обеспечивающий выход напряжения до 1,3 кВ и выдерживающий рабочий ток до 200 мА.

В качестве такого источника питания наилучшим образом подходит БП – 100, если обеспечивается регулировка входного напряжения. Печи нагрева подложки до необходимой температуры и напуска кислорода с помощью игольчатого натекаателя, напряжение горения разряда обеспечивается приложением напряжения на катод – мишень до 500 В.

Типичные условия осаждения пленок ZnO путем распыления его керамики представлены в таблице 1.

Таблица 1.

1	Остаточное давление газа в системе, П	10 ⁻³
2	Рабочий газ	O ₂
3	Давление рабочего газа, Па	13,3-0,13
4	Ток разряда, мА	60 - 450
5	Расстояние мишень – подложка, мм	25 - 40
6	Угол наклона плоскости подложки к плоскости мишени, град	45
7	Температура подложки, ⁰ С	50 - 700

Существенное влияние на вольтамперную характеристику горения разряда оказывают влияние рабочего давления газа и геометрия исполнения системы. С уменьшением давления вольтамперная характеристика разряда сдвигается в область больших рабочих напряжений и приближается к линейной зависимости.

На ВАХ разряда также оказывает влияние степень эрозии мишени. Эрозия мишени сопровождается сдвигом ВАХ в область меньших рабочих напряжений, причем этот сдвиг растет с увеличением рабочего давления. Последняя закономерность объясняется тем, что по мере распыления мишени зона разряда переходит в область более сильного магнитного поля, а также улучшаются условия.

Скорость осаждения ν ZnO на подложке пропорционально скорости распыления мишени, связь между данными величинами в общем случае выражается соотношением:

$$\nu = c\gamma I,$$

где: c – экспериментальная константа, зависящая от взаимного расположения частей системы (мишень - подложка);

I – ионный ток на мишень;

γ - коэффициент распыления мишени .

эксперимент показывает, что наблюдается уменьшение коэффициента распыления γ с увеличением рабочего давления в системе выше 1,33 Па, что связано с увеличением вероятности возвращения распыляемых атомов на мишень в результате процессов обратной диффузии и обратного рассеяния.

Установлено, что скорость роста пленок ZnO не зависит от температуры подложки в интервале температур от 50 до 800⁰С.

При распылении в чистом аргоне коэффициент распыления равен 2,9, но при этом удельное сопротивление пленок ZnO меньше 10⁻³ Ом·см. Сопротивление пленок увеличивается по мере разбавления аргона кислородом, и при 60% разбавления аргона кислородом наблюдается насыщение проводимости. В чистом кислороде коэффициент распыления ZnO γ составляет 0,9, что практически приемлемо для изготовления структур типа CdS – ZnO, ZnS – ZnO, ZnTe – ZnO и другие.

Исследование физических свойств таких структур является очень важной научно – технической проблемой

Изготовление структур типа металл-ZnO и измерение их параметров

Казимагомедов Рустам Муртузалиевич
Дагестанский Государственный Университет
Рабаданов Рабадан Абдулкадырович, д.ф-м.н
aytaumahi@mail.ru

В литературе отмечено, что отжиг ZnO в вакууме сопровождается десорбцией кислорода с его поверхности и образованием у поверхности слоя с избыточной концентрацией носителей заряда (n⁺-слоя), который способствует формированию омического контакта со структурой Me-n⁺-n. Если в вакууме в пределах 15-20 минут выдержим ZnO выше 800К и на его поверхность напылим металл, а затем охладим образец до 500К, то мы непременно получим структуру Me-ZnO, обладающую линейной ВАХ. Значение удельных переходных сопротивлений контактов, полученных на образцах ZnO с удельным сопротивлением $\rho=2\cdot 10^{-3}$ Ом·м, даны в таблице 1. Сравнительно большое контактное переходное сопротивление $\rho_k\sim 10^{-6}$ Ом·м² объясняется влиянием сопротивления растекания тока и малой концентрацией основных носителей заряда в объеме полупроводника. Опыт показывает, что последующая термообработка в инертной среде напыленных в вакууме контактов при температуре 620-720К улучшает контактные свойства

(уменьшает ρ_k , увеличивает адгезию металла к ZnO и т.д). Отжиг при более высоких температурах приводит к повышению ρ_k .

Образование поверхностного слоя p^+ -типа происходит в результате десорбции кислорода с поверхности ZnO и обогащение его приповерхностного слоя между узельным цинком Zn^+ , который при температуре отжига диффундирует к поверхности. Таким образом, для формирования низкоомных омических контактов к оксиду цинка необходимо предварительной термообработкой в вакууме при температуре выше 800K создать обогащенный основными носителями заряда приповерхностный слой, затем нанести металл с высоким сродством к кислороду (Ag, Sn, Al, In-Ni(3%)) и последующей термообработкой в вакууме или инертной среде при 620-720K формовать контакты. Такая структура и условия формирования омических контактов, возможно, справедливы и для других оксидных полупроводников p -типа проводимости. На основе исследования литературных данных мы предложили способ создания выпрямляющих контактов к оксиду цинка, отличающийся от напыления металла на сколотую ультравысоком вакууме поверхность кристалла ZnO и обладающий универсальностью (позволяет получить контакты не только к кристаллам, но и к плёнкам, которые невозможно расколоть). Этот способ изготовления контакта заключается:

- а) в предварительном отжиге ZnO на воздухе при 900-1000K в течение 20-30 минут;
- б) в напылении металла в вакууме $\sim 10^{-3}$ Па на поверхность с температурой 450-470K для обеспечения сцепления металла с ZnO;
- в) в отжиге контакта Me- ZnO на воздухе при температуре 900-1000K в течение 20-30 минут.

Таблица 1.

Контактный материал	Ag	Sn	In	Al	Au	Cu	In-Ni(3%)
$\rho_k, \text{ Ом} \cdot \text{ м}^2$	$6 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-5}$	10^{-4}	$4 \cdot 10^{-6}$	10^{-6}

Барьеры, изготовленные по такой технологии, для различных металлов имели высоту в интервале 0.3-0.6 эВ, и она уменьшалась с повышением температуры измеряемого контакта. Для контакта Ag-ZnO с увеличением температуры от 290 до 360K высота барьера уменьшается от 0.56 до 0.45 эВ, а при температурах выше 420K контакт становится омическим. Данные измерения контакта объясняются десорбцией кислорода с поверхности ZnO с повышением температуры. При понижении температуры до комнатной контакт со временем восстанавливает свои свойства, за этот процесс ответственна адсорбция кислорода. Время восстановления исходных свойств контакта удаётся сократить применением повторного его отжига на воздухе.

Предназначенный для изготовления контакта ZnO подвергался предварительному отжигу на воздухе при 900K в течении 20 минут. С повышением температуры отжига ZnO наблюдается увеличение барьера от 0.45 до 0.6 эВ. При последующем отжиге Ag-ZnO от 700 до 1100K высота барьера увеличивается от увеличения дифференциального сопротивления контакта. Этот процесс сопровождается увеличением сопротивления и глубины высокоомного приповерхностного слоя ZnO, что приводит к соответствующим изменениям свойств контакта. С ростом $T_{отж}$ меняется вид ВАХ - от линейного к экспоненциальному, а затем - к степенному виду.

Влияние винтовых супердислокаций на температурно-частотные характеристики кварцевых резонаторов

Калимгулов Айрат Ринатович

Бакирский Государственный Университет

Чувьров Александр Николаевич, д.ф.-м.н

airat@nekto.ru

Исследовано влияние кристаллизационной воды, захваченной ростовыми винтовыми супердислокациями с векторами Бюргера более 1000 [1], на эквивалентное сопротивление и частоты резонанса и антирезонанса кварцевых резонаторов.

Из полученной экспериментальной зависимости частот последовательного и параллельного резонансов от температуры видно, что в интервале температур от +21°C до -10°C частоты имеют максимум при -4°C. С понижением температуры от -4°C до -10°C резонансные частоты уменьшаются, и при температуре равной -10°C они имеют минимальное значение. При дальнейшем понижении температуры от -10°C до -65°C резонансные частоты вновь увеличиваются. Так как резонансные частоты находятся в обратно-пропорциональной зависимости от линейных размеров кварца, то можно предположить следующее качественное объяснение результатов опыта. С уменьшением температуры от +21°C до -4°C вода, находящаяся в капиллярах кварца, сжимается "увлекая" за собой кварц. С уменьшением объема кварца уменьшаются его линейные размеры, при этом резонансные частоты увеличиваются, достигая наибольшего значения при $t = -4^\circ\text{C}$, когда плотность воды максимальна. При дальнейшем понижении температуры от -4°C до -10°C начинается процесс кристаллизации воды, и объем ее, соответственно, резко увеличивается. Увеличение объема воды приводит к тому, что она "раздвигает" кварц, увеличивая его объем. Увеличение объема кварца ведет к увеличению его линейных размеров, а следовательно к уменьшению резонансных частот. При температуре $t = -10^\circ\text{C}$ вода замерзает, достигая наибольшего объема. В этом случае имеем минимальные значения резонансных частот. При понижении температуры от -10°C до -65°C лед и кварц сжимаются. Резонансные частоты при этом увеличиваются. Точка замерзания воды в этой ситуации определяется размерами полостей в ядрах винтовых супердислокаций.

Список публикаций:

[1] А.Н. Чувьров, Р.М. Мазитов, В.С. Балицкий. Механизм роста кристаллов кварца из фторидных растворов. ДАН СССР, 1979, т. 247, с. 1475.

Изменение емкостных характеристик МДП и МДМ структур при воздействии сверхкоротких импульсов электромагнитного излучения

Капранчикова Галина Александровна

Требунских Сергей Юрьевич

Воронежский Государственный Университет

Терехов Владимир Андреевич, д.ф.-м.н

root@ftt.vsu.ru

Представляя собой основу конструкций многих приборов, МДП структуры сами являются удобными объектами физических исследований, на которых могут быть выяснены механизмы электронных процессов, протекающих в приповерхностных слоях полупроводников, в диэлектриках.

Основной задачей настоящего исследования было выявление изменений вольт-фарадных характеристик тестовой МДП структуры Si/SiO₂/Al под воздействием сверхкоротких импульсов электромагнитного излучения (СКИ ЭМИ).

Использовались структуры на основе монокристаллического кремния марки КЭФ-4.5 с ориентацией <100> и толщиной подзатворного диэлектрика 125 нм.

Для облучения тестовая структура помещалась в коаксиальную нагрузку, подключаемую к генераторам СКИ ЭМИ с энергией импульса порядка 5×10^{-6} Дж. Измерялись ВФХ МДП структуры до воздействия, во время и после него. Частота тестового сигнала составляла 1 МГц при амплитуде сигнала равной 25 мВ (L,C,R измеритель типа E7-12). Напряжение смещения, подаваемое на МДП структуру варьировалось в диапазоне от -5 В до +5 В.

Влияние импульсного ЭМИ на МДП приводит к кратковременному изменению ВФХ, при чем после выключения воздействующего фактора характеристика полностью восстанавливается (рис.1).

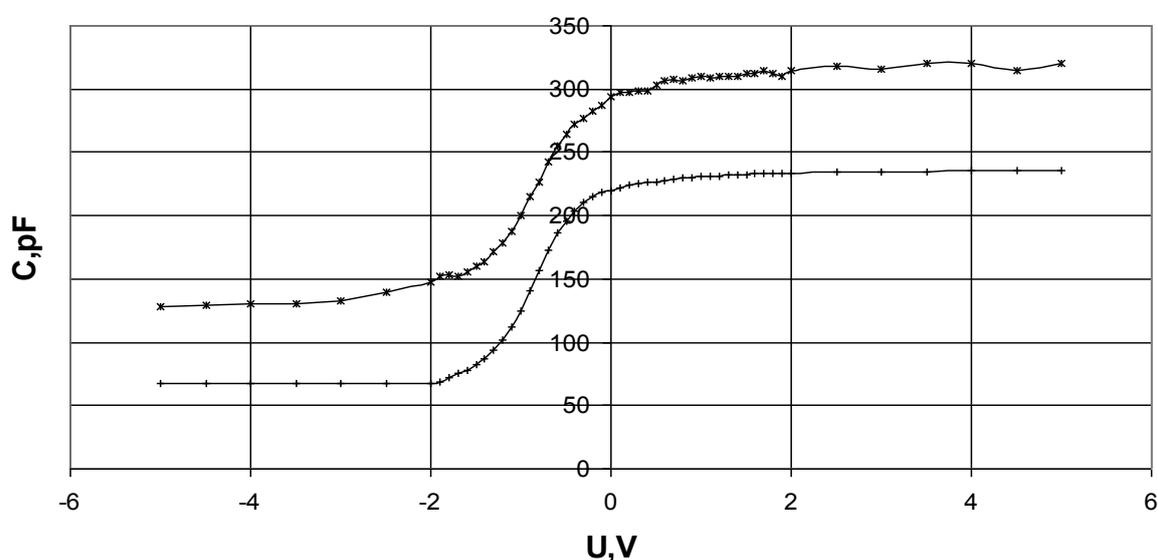


рис.1 Зависимость емкости МДП структуры от напряжения смещения
верхняя кривая - под воздействием, нижняя кривая - без воздействия

На основе, полученных данных можно выделить некоторые закономерности в характере поведения емкости МДП структуры при влиянии СКИ ЭМИ.

Установлено, что при помещении МДП структуры в коаксиальную нагрузку, подключаемую к генераторам СКИ ЭМИ, величина емкости диэлектрического слоя возрастает на 26 % по сравнению с ее значением до воздействия при том же значении напряжения смещения. Кроме этого под воздействием СКИ ЭМИ на границе раздела структуры появляются поверхностные состояния, о наличии которых свидетельствует появление наклона у ВФХ.

Эти результаты хорошо согласуются с данными, полученными на основе эксперимента по влиянию СКИ ЭМИ на кварцевые резонаторы (МДМ структуры). Согласованность заключается в сходном характере поведения емкости структур при воздействии на них СКИ ЭМИ.

Как и для МДП структуры в случае кварцевого резонатора наблюдается рост емкости диэлектрика при воздействии импульсного ЭМИ. Для значений энергии СКИ, лежащих в интервале от 4×10^{-7} до 26×10^{-7} Дж, величина емкости кварцевого резонатора изменялась на 15% по сравнению с ее значением до начала облучения. При энергиях воздействующих импульсов выше указанных возможно более значительное изменение величины емкости диэлектрика.

Уточнение положения атомов Ва и Li в структуре $\text{Ba}_4\text{Li}_2\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$.

Карпенко Евгений Константинович

Крыштон Виктор Геннадиевич

Ростовский Государственный Университет

Крыштон Виктор Геннадиевич, к.ф.-м.н

evkar@list.ru

Изучение сегнетоэлектриков со структурой тетрагональной калиево-вольфрамовой бронзы до сих пор не потеряло своей актуальности. Интерес обусловлен активным использованием устройств, содержащих эти сложные оксиды, в различных отраслях науки и техники. Устройства на основе сегнетоэлектриков кислородно-октаэдрического типа (микро-электро двигатели, высокоточные и высокотемпературные датчики, и т.д.) отвечают высоким требованиям современного научно-технического прогресса (повышение точности, надежности, скорости, уменьшение размеров и массы устройства). Особый интерес с точки зрения сочетания физических характеристик представляют сегнетоэлектрики кислородно-октаэдрического типа. $\text{Ba}_4\text{Li}_2\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$ со структурой тетрагональной калиево-вольфрамовой бронзы – высокотемпературный сегнетоэлектрик с температурой Кюри $T_c = 873 \text{ K}$ [1]. Уникальное сочетание физических характеристик является следствием кристаллической структуры этого соединения. Изучение связи состав – структура – свойства является важной задачей в физике сегнетоэлектриков. Целью данной работы является определение положений атомов Ва и Li в элементарной ячейке $\text{Ba}_4\text{Li}_2\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$ со структурой тетрагональной калиево-вольфрамовой бронзы, то есть уточнение структуры этого оксида. Были рассмотрены пять различных вариантов расположения атомов Ва и Li. Для каждого был произведен расчет структурного R-фактора. Рентгенограмма, снятая при помощи диффрактометра ДРОН-3 (излучение $\text{Cu}\alpha$), показала хорошее соответствие с теоретической рассчитанной рентгенограммой (при помощи Powder Cell 2.3) для случая, когда атомы Ва занимают позиции в пятиугольных каналах, а атомы Li располагаются в четырехугольных и треугольных каналах. Хотя существует определенная неоднозначность при определении положения атомов Li (из-за своей легкости они не дают отклика, выходящего за уровень фона, на рентгеновские волны), но об их локации можно судить по местонахождению атомов Ва, которые достаточно хорошо «видны» в рентгеновском излучении. Структурный R-фактор для данного расположения атомов Ва и Li равный 0.05, также подтверждает правильную интерпретацию экспериментальной рентгенограммы.

Влияние сильного электрического поля на диэлектрические свойства и электропроводность аморфного PbTiO_3

Климентова Татьяна Игоревна

Коротков Леонид Николаевич

Воронежский государственный технический университет

Гриднев Станислав Александрович, д.ф.-м.н

ferro@ns1.vstu.ac.ru

Аморфные и аморфно-кристаллические материалы, полученные на основе сегнетоэлектрических соединений, представляют собой новый класс материалов, физические свойства которых в настоящее время изучены явно недостаточно. Вместе с тем достаточно надежно установлено, что эти объекты обладают рядом специфических физических свойств [1-8], значительно отличающихся с одной стороны от свойств тех же веществ, находящихся в кристаллической модификации, а с другой - от свойств обычных, неполярных диэлектриков.

В, известных к настоящему времени, единичных публикациях [6-8] об исследованиях поведения аморфных «сегнетоэлектриков» в сильных электрических полях, сообщается о довольно противоречивых полученных результатах.

Целью настоящей работы явилось изучение влияния напряженности постоянного электрического поля на диэлектрические и электрические свойства аморфного материала, полученного на основе сегнетоэлектрического соединения.

Образцы получали в виде пластинок $\sim 5 \times 5 \times (0,2 \div 1,5)$ мм³ методом спиннингования [9,10]. Порошок синтезированного титаната свинца марки «ОСЧ» расплавляли в кварцевой ампуле при температуре около 1300 °С, затем струя расплава подавалась на быстро вращающийся медный диск, в результате закалки получались тонкие пластинки аморфного PbTiO₃. Рентгеноструктурный анализ подтвердил аморфное состояние материала.

Для проведения измерений на наибольшие грани образцов наносили серебряные электроды. Образцы помещали в термостат, где температура изменялась от 20 до 500 °С и контролировалась с погрешностью не более ± 1 °С.

Измерения вольтамперных и вольтфарадных характеристик в диапазоне полей $E=(0 \div 30)$ кВ·см⁻¹ осуществляли в режиме термостабилизации. Изменения температуры в ходе измерений не превышали ± 2 °С.

Значения диэлектрической проницаемости ϵ и электрической проводимости σ монотонно и нелинейно возрастают с увеличением напряженности поля смещения. Величина диэлектрического отклика пропорциональна электропроводности образца. Это обстоятельство говорит о том, что возрастание ϵ с ростом поля E обусловлено не перестройкой электрической дипольной структуры, а преимущественно связано с увеличением концентрации носителей заряда под действием электрического поля.

Для выяснения механизма, обуславливающего нелинейность электрической проводимости, были измерены в квазистатическом режиме вольтамперные характеристики образцов аморфного титаната свинца при различных температурах. Анализ полученных экспериментальных результатов позволил предположить, что полевые зависимости плотности тока J могут быть удовлетворительно описаны в рамках механизма, учитывающего инжекцию носителей заряда из электродов в диэлектрик, характеризующийся непрерывным спектром локализованных состояний в запрещенной зоне [11]. Согласно [11] зависимость J от напряжения U имеет степенной характер

$$J \sim U^n, \quad (1)$$

где U – напряжение, приложенное к образцу, n - параметр.

Построенные зависимости (1) в координатах $\ln J$ от $\ln E$ показали, что экспериментальные точки достаточно хорошо ложатся на прямые линии из наклона прямых оценен параметр $n \approx 1,5$, что соответствует теоретическим предсказаниям [11]. Установлено, что в условиях проведенного эксперимента n слабо изменяется с температурой.

Таким образом, основываясь на изложенных выше экспериментальных результатах, можно заключить, что наблюдаемое в аморфном титанате свинца увеличение диэлектрической проницаемости и электрической проводимости под действием электрического смещающего поля преимущественно обусловлено инжекцией носителей заряда в диэлектрик из материала электродов. Нелинейный вид зависимости $J(E)$ позволяет предполагать широкий спектр локализованных электронных состояний в запрещенной зоне аморфного материала, что подтверждается результатами исследования частотных зависимостей диэлектрической проницаемости и электрической проводимости.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 02-02-16267.

Список публикаций:

- [1] Lines M.E. // *Phys. Rev. B*. 1977. V. 15. №1. P.388.
[2] Takashige M., Nakamura T. // *J. Phys. Soc. Jap.* 1980. V.49. Suppl. B. P.143.
[3] Multani N.S., Ayyub P., Palkar V.R. et al. // *Bull. Matter. Sci.* 1984. V.6. N.2. P. 327.
[4] Kitabatake M., Mitsuyu T., Wasa K. // *J. Appl. Phys.* 1984. V.56. P. 1780.
[5] Nakamura T., Takashige M., Terauchi H., et al // *Jap. J. Appl. Phys.* 1984. V.23. P. 1265.
[6] Xu Yu., Mackenzie J.D. // *Integrated Ferroelectrics*. 1992. V.1. P. 17
[7] Bahgat A.A., Kamel T.M // *Phys. Rev. B*. 2000. V.63. P. 12101
[8] Korotkov L.N., Gridnev S.A., Khodorov A.A. et al // *Ferroelectrics*. 2003. V. 286. P.101.
[9] Лухачев В.А., Шудегов В.Е. *Принципы организации аморфных структур. Изд. С.- Петербургского университета.* 1999. 288 с.
[10] Золотухин И.В., Калинин Ю.Е., Стогней О.В. *Новые направления физического материаловедения: Учебное пособие. Воронеж: Издательство Воронежского государственного университета.* 2000. 360 с.
[11] Ламперт М., Марк П. *Инжекционные токи в твердых телах.* М.: Мир. 1973. 416 с.

Явления инерции носителей заряда в гетероструктурах SiC/Si

Колесникова Анна Алексеевна

Шербак Андрей Владимирович

Самарский государственный университет

Комов Александр Николаевич, д.т.н

Abp@mail15.com

Возможности использования карбида кремния и его структур в целях контроля больших уровней СВЧ мощности является одной из актуальных проблем[1,2]. Изучение инерционных явлений носителей заряда позволяет определить частотный предел применения таких структур в области сверхвысоких частот.

Рассмотрим условия возникновения явления инерционности носителей заряда в СВЧ поле. Пусть напряженности электрического и магнитного полей гармонически меняются со временем с частотой ω . Кинетическое уравнение Больцмана, описывающее в этом случае движение носителей, принимает вид

$$\frac{\partial f}{\partial t} - e(\vec{E}, \nabla_p f) + \frac{f - f_0}{\tau(\varepsilon)} = 0$$

Решение этого уравнения приводит к выражению для функции распределения

$$f = f_0 + \frac{e}{m} (\vec{P}, \vec{E}_0) \frac{\tau}{1 - i\omega\tau} f'_0 e^{-i\omega t}$$

Из этого выражения видно, что между колебаниями неравновесной части функции распределения f_1 и напряженностью \vec{E} имеется сдвиг фаз, равный $\arctg(\omega\tau)$. Когда период колебаний значительно превышает время релаксации, этот сдвиг очень мал. В противоположном случае он оказывается близким к $\pi/2$. В этом смысле можно сказать, что газ носителей заряда обладает «инерцией». Однако, этот эффект обусловлен не массой частиц, а статистическими свойствами их системы. Именно, поле ускоряет все электроны (дырки) одинаково, но на виде функции распределения это сказывается лишь в результате столкновений.

В настоящей работе применен метод определения инерции носителей на СВЧ, основанный на радиоэлектрическом эффекте в полупроводниках [3]. Известно, что радиоэдс определяется по формуле:

$$V = \frac{4\pi}{c^2} \mu_H WL$$

где μ_H – холловская подвижность носителей заряда, W – интенсивность электромагнитной волны, L – длина образца вдоль направления распространения волны.

По технологии, разработанной в Самарском государственном университете изготовлены образцы гетероструктур SiC/Si n-p и p-p типа. Измерения выполнялись на частоте 10 ГГц. Исследованы зависимости радиоэдс для полученных структур от уровня СВЧ мощности, от направления потока излучения, от температуры окружающей среды. Чувствительность элемента радиоэдс составила 10 мкВ/Вт. Изменение чувствительности в диапазоне температур 120-380 К не превышает 9%.

Проведена оценка влияния термоэдс на выходной сигнал преобразователя. Отношение термоэдс к радиоэдс менее 0,03. Установлено, что зависимость радиоэдс от уровня СВЧ мощности имеет линейный характер до 10 Вт проходящей мощности.

Подвижность свободных носителей заряда на СВЧ составила $670 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ на частоте 10 ГГц; на постоянном токе – $700 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$. Коэффициент инерции $\gamma = 0,92$. Так как проявление инерционных свойств обычно учитывается при отклонении значения γ от единицы на 10%, то в нашем случае явление инерционности носителей заряда очень мало и практически не вносит искажений в измеряемые параметры и характеристики, следовательно, можно считать полученные структуры безынерционными. Оценка инерционности носителей заряда показала возможность использования структур SiC/Si до частот более 40 ГГц. Экспериментальные результаты хорошо согласуются с теоретическими расчетами.

Список публикаций:

- [1]. Комов А. Н., Трецев В. М., Яровой Г. П. Гальваномагнитные СВЧ-преобразователи // Под. Ред. А. Н. Комова. М.: Радио и связь, 2000, - С. 127.
 [2]. Лучинин В. В., Таиров Ю. М. SiC – перспективный материал электронной техники // Электроника. – 1997. – №1. – С. 10 – 37.
 [3]. Комов А. Н., Чепурнов В. И. Радиоэлектрический эффект в структурах n-3C-SiC/n-Si в трехсантиметровом диапазоне длин волн. // Известия вузов. Электроника. – 2001. – №1 С. 76 – 79.

Исследование ВАХ тонкопленочных наногранулированных композитов металл-диэлектрик в режиме сильного электрического поля

Копытин Михаил Николаевич

Ситников Александр Викторович, Любашевский Дмитрий Евгеньевич

Воронежский Государственный Технический Университет

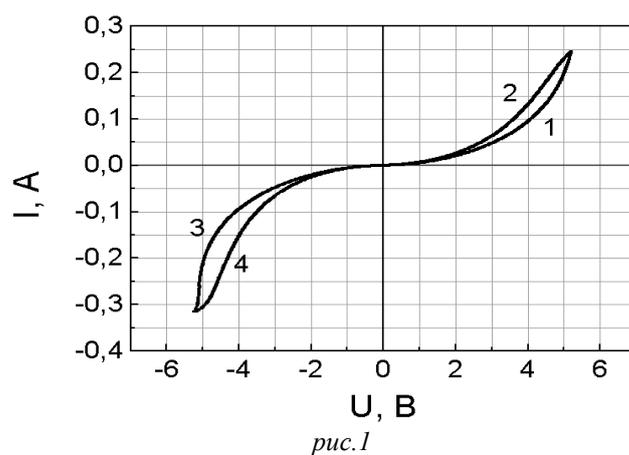
Стогней Олег Владимирович, к.ф-м.н

michaelkopitin@mail.ru

Тонкопленочные наногранулированные композиты металл-диэлектрик представляют собой сложные системы, состоящие из металлических гранул размером 2-5 нм, расположенных случайным образом в диэлектрической матрице и изолированных друг от друга. Такая морфология обуславливает, с одной стороны, неравномерное распределение электрического поля в объеме материала, а с другой – позволяет реализовать режим электропереноса в условиях сильных электрических полей при комнатных температурах. Исследованные в работе композиты были получены методом ионно-лучевого распыления составной мишени (сплавная

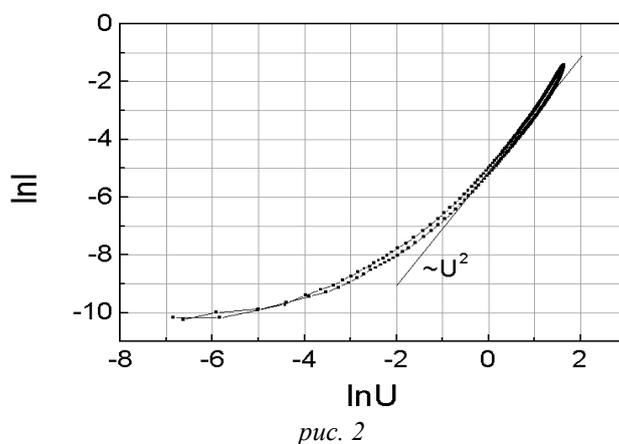
мишень $\text{Co}_{41}\text{Fe}_{39}\text{B}_{20}$ с навесками SiO_2) в атмосфере аргона. Режим сильного электрического поля был реализован благодаря тому, что напряжение прикладывалось перпендикулярно пленке композита. При величине напряжения на образце 9 В и толщине пленки композита 5 мкм значение напряженности электрического поля между соседними гранулами составляет величину более $\sim 2,5 \cdot 10^6$ В/м, что удовлетворяет условию сильного электрического поля (энергия электрического поля больше или равна тепловой энергии при данной температуре).

Для вольт-амперных характеристик (ВАХ) исследованных композитов характерны следующие особенности. Во-первых, наблюдается несимметричность ВАХ, т.е. для одних и тех же значений напряжения противоположной полярности величина тока различна (см. рис.1, цифрами показана последовательность снятия ВАХ).



Во-вторых, в области высоких значений напряжений существует гистерезис ВАХ, предположительно обусловленный процессами поляризации диэлектрика. В-третьих, того, установлено, что вид ВАХ зависит от электрической предыстории образца, т.е. от величины и знака напряжения предварительно подаваемого на образец.

При перестроении ВАХ в двойных логарифмических координатах на кривой наблюдается участок, соответствующий квадратичной зависимости тока от приложенного напряжения (рис. 2). Такая зависимость характерна для электропереноса, реализующегося в диэлектрических материалах в сильных



электрических полях. Данный механизм электропереноса обусловлен током, ограниченным пространственным зарядом. [1]. По всей видимости, в нашем случае подобная ситуация реализуется в диэлектрических прослойках между металлическими гранулами. На рис.2

показана часть ВАХ, соответствующая кривой для положительных напряжений на рис. 1. При перестроении части ВАХ для отрицательных напряжений также наблюдается участок, для которого величина тока пропорциональна квадрату напряжения.

Список публикаций:

[1] Kopitin M.N., Stognei O.V., Sitnikov A.V., Kalinin Yu.E., (Abstracts) International Conference On Magnetism (ICM 2003), Roma, Italy, July 27-August 1 (2003).

[2] Копытин М.Н., Тезисы ВНКФ-9, 663-664 (2003).

[3] Копытин М.Н., Ситников А.В., Стогней О.В., Вестник Воронежского Государственного Технического Университета, вып. 1.13, 32-37 (2003).

[1] Рез И.С., Поплавко Ю.М. Диэлектрики. Основные свойства и применения в электронике. М.: Радио и связь, (1989).

Исследование тонких пленок Fe методом эллипсометрии

Косырев Николай Николаевич

Варнаков Сергей Николаевич

Институт Физики им. Л. В. Киренского СО РАН

Овчинников Сергей Геннадьевич, д.ф.-м.н

nick@iph.krasn.ru

При получении многослойных наноструктур возникает проблема контроля параметров технологического процесса. В частности, при росте тонких слоев Fe в условиях сверхвысокого вакуума, требуется точное определение скорости напыления, а также толщины получаемой пленки. Большое преимущество здесь имеют оптические методы, так как они не оказывают воздействия на исследуемый объект. Нами был выбран метод эллипсометрии, основанный на измерении изменения состояния поляризации света после его отражения о поверхности образца и позволяющий с большой точностью определить оптические параметры системы, а также толщину получаемой пленки.

В данной работе проведены эллипсометрические исследования различных стадий технологического процесса роста тонких пленок железа на установке молекулярно – лучевой эпитаксии «Ангара». В качестве подложки использовалась пластина монокристаллического кремния (100). Для измерений применялся эллипсометр ЛЭФ-751М, разработанный в Новосибирском Институте физики полупроводников. Прибор создан на основе статической измерительной схемы, которая обеспечивает очень высокую скорость измерений, за счет того, что отсутствуют вращающиеся элементы.

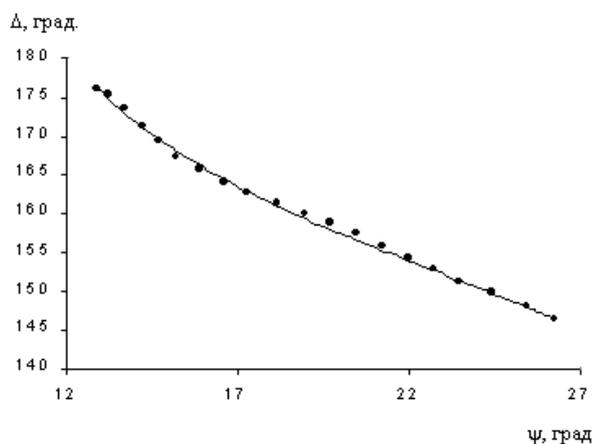


рис. 1

Для определения толщины растущей пленки, скорости роста, а также оптических параметров пленки была решена графоаналитическим методом обратная задача эллипсометрии (рис.1). На рисунке сплошной линией показана модельная кривая, показывающая изменения параметров ψ и Δ , в зависимости от толщины при фиксированных значениях показателей преломления и поглощения (при расчете использовано приближение однослойной системы), точками – экспериментальные значения эллипсометрических углов. Полученное значение толщины пленки согласуется в пределах погрешности с данными рентгеноспектрального флуоресцентного анализа.

Методика вычислений энергетических спектров и температурных распределений выхода кластеров при ионном распылении металла

Кочкин Сергей Алексеевич

Поморский Государственный Университет

Матвеев Виктор Иванович, д. ф-м. н.

skochkin@atnet.ru

Во многих случаях экспериментальные исследования процессов ионного распыления твердых тел в виде кластеров направлены на выяснения механизмов, обуславливающих наличие в продуктах распыления многоатомных частиц. Обычно проводятся измерения энергетических спектров и распределений нейтральных и однократно заряженных кластеров по размерам в зависимости от типа мишени, состава и тока бомбардирующих частиц, а также зависимостей выхода нейтральных и заряженных кластеров от температуры мишени, несущих более подробную информацию о механизмах формирования кластеров. В данной работе расчет энергетических спектров и температурных зависимостей нейтральных и заряженных кластеров с числом атомов $N \geq 5$ при ионном распылении металла производился на основе физических представлений, предложенных в работе [1]. Считаем твердое тело образованным из атомов, каждый из которых находится в осцилляторной яме глубиной Δ и имеет собственную частоту ω . Пусть скорость падающего иона такова, что за время $\tau \ll T = 2\pi/\omega$ ион и быстрые атомы отдачи при движении в металле претерпевают большое число столкновений, в результате которых атомы металла получают некоторые импульсы \mathbf{q}_i , где i - номер атома. Тогда, согласно [1], вероятность вылета кластера из N атомов как целого с импульсом \mathbf{k} , равна

$$W_{\mathbf{k}} = \left| \langle \Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R}) | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i \mathbf{R}\right) | \Phi_0(\mathbf{R}) \rangle \right|^2 \exp\left(-\frac{1}{n_0} \frac{1}{2\alpha^2 \hbar^2} \sum_{i=1}^N \mathbf{q}_i^2\right), \quad (1)$$

где $\alpha^2 = m\omega/\hbar$, m - масса атома, \hbar - постоянная Планка, $n_0 = \Delta/\hbar\omega$; $\Phi_0(\mathbf{R})$ - волновая функция основного состояния центра масс блока из N атомов, $\Phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{R})$ - волновая функция центра масс блока в состоянии непрерывного спектра с импульсом \mathbf{k} , \mathbf{R} - координаты центра масс. Считается, что центр масс блока из N атомов движется в сферически симметричном осцилляторном потенциале $U(\mathbf{R}) = mN\Omega^2 \mathbf{R}^2/2$, обрезанным на высоте U_N , имеющей смысл энергии связи кластера с металлом. Согласно [1], $U_N = \delta N^{2/3}$, где δ имеет смысл энергии связи кластера, отнесенной к одному атому в составе кластера. В результате (см. [1,2]) получается энергетический спектр кластеров из N атомов и имеющих заряд Qe (e – заряд электрона) в виде

$$\frac{d\overline{W}_N^Q}{dE_c} = \left\{ f(E_c) |C|^2 \left(\frac{d\overline{W}_N}{dE_c} \right)_2 + [1 - f(E_c)] \left(\frac{d\overline{W}_N}{dE_c} \right)_1 \right\} \frac{1}{D_N} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{(Q - Q_0)^2}{(\Delta Q_N)^2 + \beta} \right\}, \quad (2)$$

$$\left(\frac{d\overline{W}_N}{dE_c} \right)_1 = \frac{(E_c + U_N)^{1/2}}{\varepsilon^{3/2} \Gamma(3/2, U_N/\varepsilon)} \left[1 - \left(1 + \frac{\varepsilon}{U_N} \right)^{-3/2} \right] \exp \left(-\frac{E_c + U_N}{\varepsilon} - N \frac{3}{2} \frac{\varepsilon}{\Delta} \right), \quad (3)$$

$$\left(\frac{d\overline{W}_N}{dE_c} \right)_2 = \frac{3}{2} \left[1 + \frac{E_c + U_N}{\varepsilon} \right]^{-5/2} \frac{(E_c + U_N)^{1/2}}{\varepsilon^{3/2}} \exp \left(-N \frac{3}{2} \frac{\varepsilon}{\Delta} \right), \quad (4)$$

$$D_N = \sum_Q \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{(Q - Q_0)^2}{(\Delta Q_N)^2 + \beta} \right\}, \quad \overline{(\Delta Q_N)^2} = \frac{3^{1/3} m_e \Theta \left(\frac{V}{N} \right)^{2/3}}{\pi^{4/3} \hbar^2} \gamma^{1/3} N, \quad Q_0 = \frac{3^{1/3} m_e \Delta \mu \left(\frac{V}{N} \right)^{2/3}}{\pi^{4/3} \hbar^2} \gamma^{1/3} N,$$

где $\varepsilon = (2/3)q^2 / (2m)$, $\Gamma(x, y)$ - неполная Γ -функция, $E_c = \mathbf{k}^2 / (2mN)$ - энергия центра масс в непрерывном спектре, $f(E_c) = \exp[-E_c^2 / \varepsilon^2]$ (см. [2]), m_e - масса электрона зоны проводимости, V - объем кластера, Θ - температура мишени, γ - валентность атомов металла, β - параметр, соответствующий квантовым флуктуациям заряда при нулевой температуре мишени, $\Delta \mu$ - разность между уровнями Ферми в металле и в кластере и

$$|C|^2 = \left(\int_0^\infty f(E_c) \left(\frac{d\overline{W}_N}{dE_c} \right)_1 dE_c \right) / \left(\int_0^\infty f(E_c) \left(\frac{d\overline{W}_N}{dE_c} \right)_2 dE_c \right).$$

На рис.1 приведен относительный энергетический спектр I_7^{+1} однозарядных кластеров Nb_N с числом атомов $N = 7$ при бомбардировке ионами Au^{-1} при энергии 6кэВ, где $I_N^Q = \left(\frac{d\overline{W}_N^Q}{dE_c} \right) / \left(\frac{d\overline{W}_N^Q}{dE_c} \right)_{E_c=0}$. В подтверждение следующей из (2) слабой зависимости относительных энергетических спектров от числа частиц в кластере на рис. 2 приведены относительные энергетические спектры I_N^{+1} однозарядных кластеров Fe_N с числом атомов $N = 7, 8, 9$ при бомбардировке ионами Xe^{+1} при энергии 8.5кэВ. Теоретические результаты зависимостей выхода кластеров от температуры мишени также обнаруживают неплохое согласие с экспериментом.

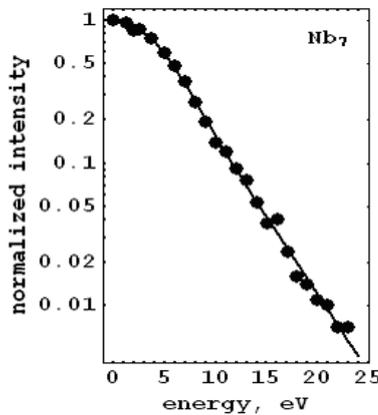


рис. 1

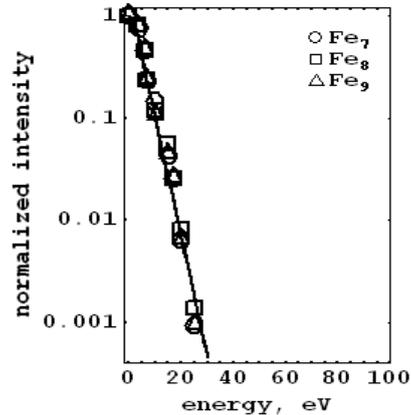


рис. 2

Список публикаций:

[1] Матвеев В.И., ЖТФ, 72, 116-120 (2002).

[2] Матвеев В.И., Кочкин С.А., ЖТФ, 74, 65-71 (2004).

Исследование ниобата серебра в широком интервале температур и частот

Кравченко Олег Юрьевич

Ростовский государственный университет

*Резниченко Лариса Андреевна, д.ф.-м.н., Турик Анатолий Васильевич, д.ф.-м.н.
olukrav@mail.ru*

Целью данной работы является исследование диэлектрических свойств керамики ниобата серебра стехиометрического (AgNbO_3) и нестехиометрического ($\text{Ag}_{1-x}\text{NbO}_{3-x/2}$), при значениях $x = 0,02; 0,04; 0,06; 0,08; 0,1; 0,125; 0,15$ и $0,2$.

Образцы для исследований получены по обычной керамической технологии. Выбор оптимальных условий синтеза и спекания керамического материала осуществлён путём варьирования дисперсионных сред, длительностей и кратностей помолов, значений температур, времени изотермической выдержки атмосфер и кратностей обжигов.

В качестве реагентов при синтезе использованы Nb_2O_5 квалификации "осч" (особо чистый) или "Нбо-Пт" (технический), а также карбонат серебра Ag_2CO_3 квалификации "ч" (чистый).

Синтез материалов проводился в две стадии: при 800°C в течение 4 часов, затем при 900°C в течение 4 часов.

Для изготовления керамики измельчённый синтезированный материал был спрессован в виде дисков и обжигался при температуре 1080°C в течение 2,5 часов. Плотность керамических образцов определялась методом гидростатического взвешивания в октане и колебалась в пределах 80-95% от теоретической. Изготовление измерительных образцов включало две технологические операции: механическую обработку и нанесение электродов. Образцы изготавливались в виде дисков (диаметр \times высота) 10×1 мм. Обработка поверхностей осуществлялась алмазным инструментом по 6 классу точности. Электроды наносились вжиганием серебрясодержащей пасты при 800°C в течение 0,5 часа.

Рентгеноструктурные методы проводили методом порошковой дифракции на дифрактометрах ДРОН-3 и АДП ($\text{Fe}_{\text{K}\alpha}$ -излучение; Mn-фильтр; $\text{Fe}_{\text{K}\beta}$ -излучение; схема фокусировки по Брэггу-Брентани). В качестве объектов использовали измельчённые керамики, что позволяло исключить влияние поверхностных эффектов, напряжений и текстур, возникающих в процессе их приготовления. Порошки запрессовывали в кварцевую кювету без использования пластификатора во избежание дополнительного диффузного рассеяния. Профили рентгеновских линий получали методом $\theta-2\theta$ в режиме пошагового сканирования (с шагом $0,01$ град по 2θ , время набора импульсов в каждой точке – 10 с), а также в режиме записи на диаграммную ленту со скоростью движения счётчика $\frac{1}{2}$ и $\frac{1}{4}$ град/мин. интегральную интенсивность рассчитывали как площадь под кривой распределения интенсивности методом Симпсона. По стандартным методикам рассчитывали параметры и объёмы элементарных ячеек.

Удельное сопротивление измерительных образцов составляло 1-6 ГОм * м.

Температурные зависимости диэлектрической проницаемости $\epsilon(T)$ и тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta(T)$ исследовались на частотах 1 кГц, 16кГц, 0,5МГц в температурном интервале $20-600^\circ\text{C}$. Измерения проводились при использовании моста ёмкостей Е8-2. Экспериментальные точки снимались через каждые $5-6^\circ\text{C}$.

На рис. 1 приведены зависимости $\epsilon(T)$ и $\text{tg}\delta(T)$ неполяризованных образцов, измеренных на частотах 1кГц (а) и 16 кГц (б).

Из рис. хорошо видны аномалии исследованных характеристик в областях 50-70 °С, 80-100 °С, 150-170 °С, 225-270 °С, 310-320 °С, 340-360 °С, 370-380 °С, 390-400 °С, 455-470 °С, 490-520 °С, 540-570 °С. Проведённые параллельно с диэлектрическими измерениями исследования кристаллической структуры $Ag_{1-x}NbO_{3-x/2}$ показали существование в указанных температурных интервалах фазовых превращений различной природы. В докладе подробно обсуждается механизм наблюдаемых структурных перестроек.

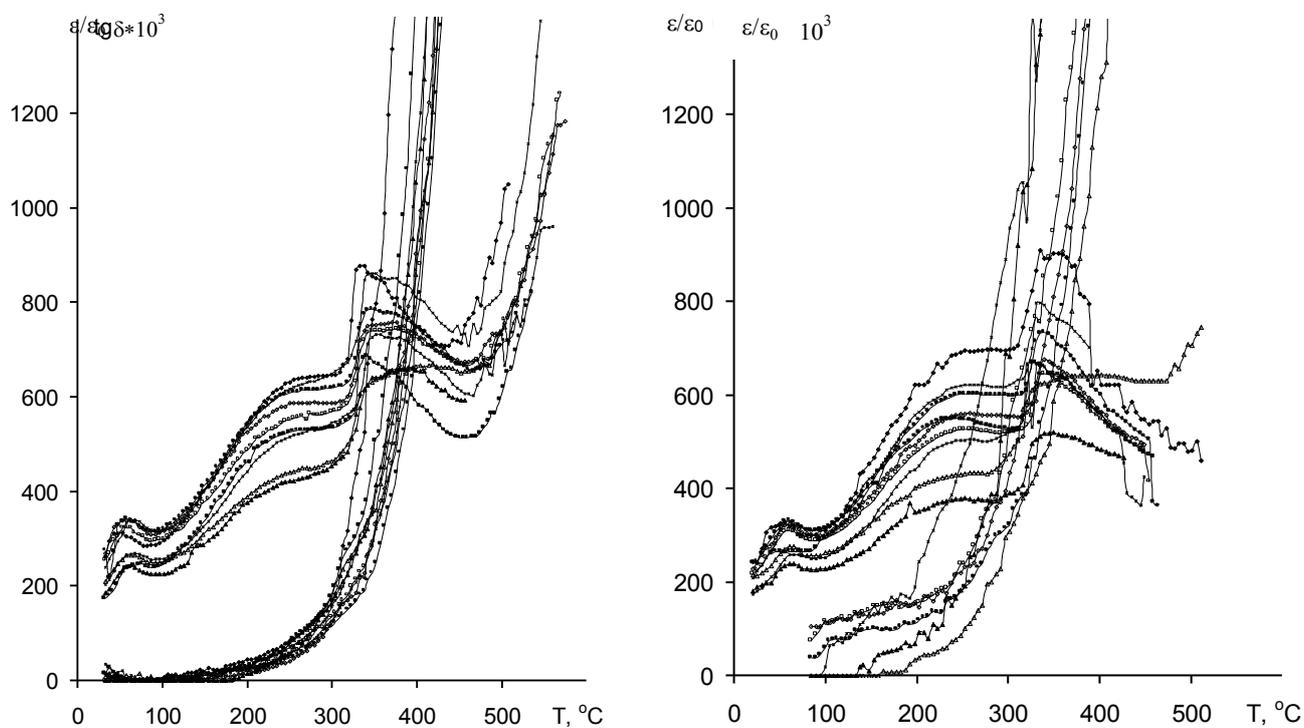


рис. 1. Зависимость $\varepsilon(T)$ и $tg\delta(T)$ неполяризованных образцов керамического состава $Ag_{1-x}NbO_{3-x/2}$, измеренных на частотах 1 кГц (слева) и 16 кГц (справа).

- | | | |
|-----------|----------|----------|
| ◆ x=0 | ■ x=0,02 | ▲ x=0,04 |
| ✕ x=0,06 | ✱ x=0,08 | ● x=0,1 |
| ◇ x=0,125 | ▣ x=0,15 | △ x=0,2 |

Измерение $\varepsilon/\varepsilon_0$ в диапазоне частот 10^2 - $2 \cdot 10^8$ Гц, проведённые на приборах E8-2, BM311 G и BM409 G, показали её постоянство на этих частотах.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 02-02-17781)

Определение энергетического спектра носителей заряда в гетероструктурах с квантовыми ямами GaAs/In_xGa_{1-x}As

Кузнецова Анастасия Николаевна

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ»

Зубков Василий Иванович, доц., к.ф.-м.н

knastik@land.ru

На основе структур с одиночными квантовыми ямами в настоящее время делают селективные фотоприемники, лазерные диоды, транзисторы с высокой подвижностью электронов.

Определение энергетического положения связанных состояний в квантовых ямах имеет огромное значение, так как именно оно определяет рабочую длину волны будущего прибора.

В ходе работы были исследованы образцы с одиночными квантовыми ямами GaAs/In_xGa_{1-x}As, выращенные методом MOVPE в реакторе горизонтального типа, при температуре 650 °С и 770 °С на n⁺-GaAs-подложке. Толщина активной области составляла 6.0...9.5 нм, содержание In x=0.065...0.29. Для получения высококачественного активного слоя скорость его роста была намного меньше, чем остальных областей. Для проведения измерений делался омический контакт и барьер Шоттки.

Из-за различия в параметрах решеток GaAs и твердого раствора In_xGa_{1-x}As на границе возникают механические напряжения, которые приводят к модификации зонной диаграммы, меняются величины разрывов зон, и, следовательно, уровни квантования оказываются смещенными.

С помощью виртуального инструмента расчета энергетического спектра носителей заряда в гетероструктурах с квантовыми ямами, реализованного в LabVIEW, получено численное решение уравнения Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \cdot \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1),$$

где \hbar - постоянная Планка, m^* - эффективная масса, $\psi(x)$ - волновая функция, $U(x)$ - потенциал, E - энергия.

Оно было преобразовано к конечно-разностному виду:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_j^*} \cdot \frac{\psi_{i,j+1} + \psi_{i,j-1} - 2\psi_{i,j}}{\Delta x_j^2} + U_i \psi_{i,j} = E_i \psi_{i,j} \quad (2)$$

и решалось с использованием трехдиагональной матрицы, все остальные элементы которой оказываются нулевыми.

Элементы главной диагонали:

$$a_j = U_i + \frac{\hbar^2}{m_j^*} \cdot \frac{1}{\Delta x_j^2} \quad (3)$$

элементы двух других диагоналей:

$$b_j = -\frac{\hbar^2}{m_j^*} \cdot \frac{1}{\Delta x_j^2} \quad (4).$$

В результате расчетов получены зависимости положения связанного состояния в гетероструктурах с квантовыми ямами GaAs/In_xGa_{1-x}As с различными параметрами, такими как состав твердого раствора, ширина активной области, прикладываемое обратное смещение.

При увеличении доли индия (0,065...0,3) в составе твердого раствора растет различие в значениях ширин запрещенных зон, следовательно, растет разрыв зон на гетерогранице, увеличивается глубина квантовой ямы и глубина залегания связанного состояния (см. рис.1)

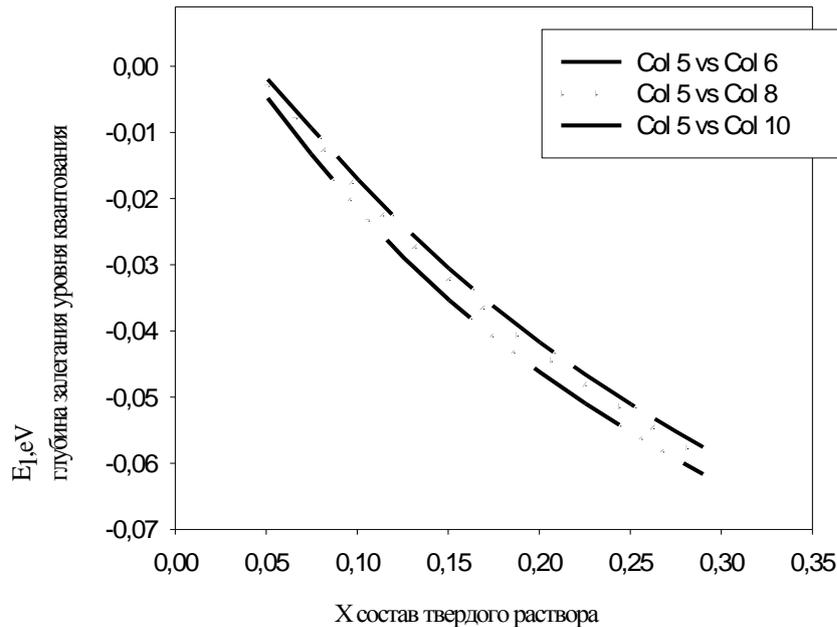


рис.1. Зависимость положения связанного уровня от состава твердого раствора In_xGa_{1-x}As для гетероструктур с различной толщиной активной области

При увеличении ширины квантовой ямы уровень квантования также оказывается ниже. Положение связанного состояния оказалось более чувствительным к изменению состава твердого раствора.

Кроме того, можно изменять положение энергетического уровня в квантовой яме, прикладывая обратное смещение. До -2,5 В никаких изменений не наблюдается, при дальнейшем увеличении смещения, уровень поднимается и при -5 В изгиб зон становится настолько сильным, что выталкивает связанный уровень в континуум.

Особенности получения резистивных пленок на основе хромоникелевых сплавов

Куклин Василий Григорьевич

Пензенский Государственный Университет

Аверин Игорь Александрович, к.ф.-м. н

micro@diamond.stup.ac.ru

Тонкопленочные многокомпонентные системы, сформированные в вакууме, интенсивно используются в производстве полупроводниковых приборов и интегральных микросхем, а также при изготовлении фотошаблонов – основного технологического инструмента микроэлектроники. В качестве объекта исследования используется хромоникелевый сплав с добавлением алюминия и меди.

Для получения пленок этих сплавов применяется метод термического напыления в вакууме, который основан на нагреве вещества в специальных испарителях до температуры, при которой начинается процесс испарения или сублимации с последующей конденсацией паров вещества в виде тонких пленок на подложках, расположенных на некотором расстоянии от испарителя. Испарение материала осуществляется из оптически плотного испарителя, изготовленного из вольфрама, который позволяет создавать однородную газовую среду при синтезе многокомпонентных систем. Сила тока, протекающего через резистивный испаритель, и задаваемая в процессе синтеза, составляет $250 \div 350$ А. Осаждение пленок происходит на ситалловые подложки, которые нагревают до $473 \div 623$ К. Процессы, происходящие при нанесении тонких пленок, во многом определяются степенью вакуума в рабочей камере, которая обуславливает среднюю длину свободного пробега частиц осаждаемого вещества. В процессе синтеза вакуум задавался порядка $10^{-5} - 10^{-6}$ Па. Толщина синтезированных пленок составляет $0,1 \dots 0,9$ мкм. На полученных пленках были сформированы следующие электрические контакты: Al; Cu; Ta; Cr; In; Cr+Al; Cr+Cu методом термического испарения в вакууме. Форма, геометрические размеры резистивных пленок и электрических контактов к ним задаются биметаллическими масками. На полученных, таким образом, пленках исследовалось изменение сопротивления в процессе хранения. На рис. 1 представлена типичная зависимость сопротивления резистивной пленки с контактами из индия от времени хранения.

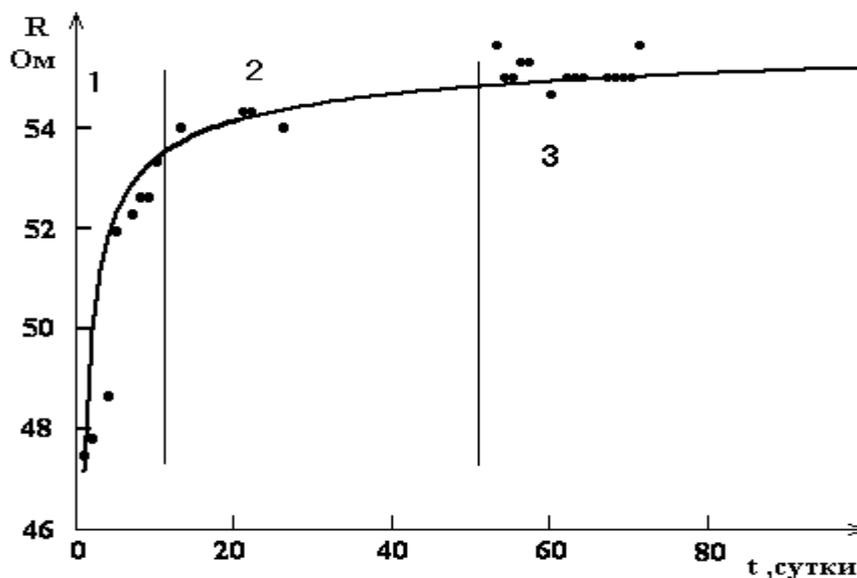


рис. 1 Зависимость сопротивления пленки от времени хранения

• - экспериментальные значения,

– - теоретически рассчитанные данные по уравнению (1).

Видно, что данную зависимость условно можно разбить на три области:

1 – область резкого роста сопротивления;

2 – область плавного роста сопротивления;

3 – область стабилизации сопротивления, т.е. сопротивление практически не изменяется, либо изменяется настолько, что изменение сопротивления можно не учитывать.

Для описания зависимости сопротивления пленки от времени хранения предложена математическая модель вида

$$R = R_0 \cdot \left(1 + \exp\left(\frac{-E_k}{k \cdot T}\right) \right) + \left(1 - \frac{1}{A^n} \right) + B \cdot \frac{\sqrt{D \cdot t} \cdot x}{\sqrt{\pi}} \quad (1)$$

где R_0 – сопротивление пленки, измеренное сразу после напыления, E_k – высота потенциального барьера между контактом и пленкой, k – постоянная Больцмана, T – температура, $n=0.4..0.7$ – коэффициент, определяющий интенсивность рассеяния носителей заряда, A, B – эмпирические коэффициенты, D – коэффициент диффузии, t – время хранения, x – глубина диффузии.

Таким образом, разработаны методика получения резистивных пленок на основе хромоникелевого сплава и математическая модель, описывающая зависимость изменения сопротивления от времени хранения пленок, полученных при различных условиях синтеза.

Модель переключения в структуре Si-SiO₂-VO₂

Кулдин Николай Александрович

Величко Андрей Александрович

Петрозаводский государственный университет

Стефанович Генрих Болеславович д.ф.м.н

kuldin@psu.karelia.ru

Несмотря на большое число исследований фазового перехода металл-полупроводник в двуокиси ванадия, перспективы практического применения этого явления продолжают привлекать внимание исследователей. В [1,2] нами была описана структура на основе Si-SiO₂-VO₂, динамикой переключения которой можно управлять напряжением смещения на Si – подложке, либо освещением.

В данной работе представлены результаты моделирования динамики переключения.

Эквивалентная схема Si-SiO₂-VO₂ структуры представлена на рисунке 1.а, где R_l – ограничительное сопротивление, R_v – сопротивление пленки диоксида ванадия, C – емкость МДП-структуры, состоящая из трех емкостей (рис.1.б) C_{ox} – емкость подзатворного диэлектрика SiO₂, C_{sc} – емкость области пространственного заряда (ОПЗ) C_{ss} – емкость поверхностных состояний (ПС)

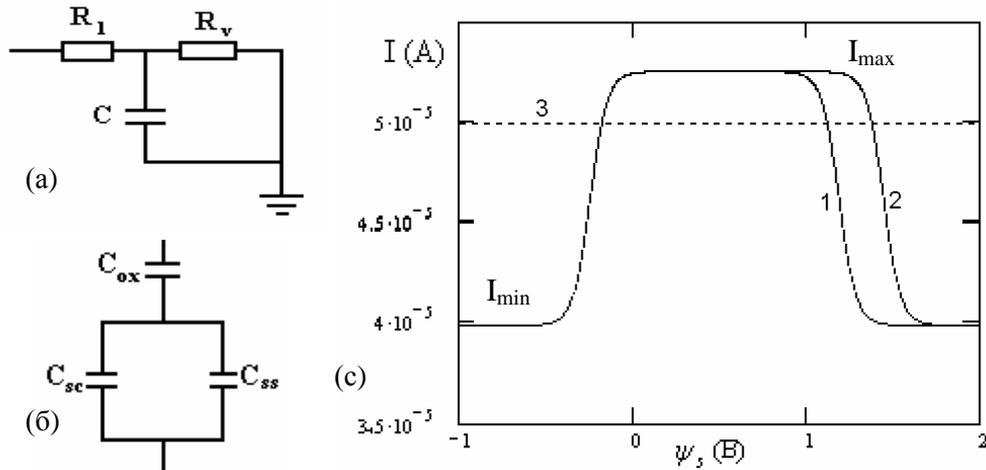


рис 1.

При подаче переменного напряжения U , через резистор R_v протекает ток который при превышении некоторого амплитудного значения I_k вызывает эффект переключения, обусловленный разогревом VO_2 до температуры фазового перехода металл-полупроводник (ФМП). Было промоделировано амплитудное значение тока в зависимости от поверхностного потенциала, определяемого напряжением смещения, и сравнение его с I_k . В модели учитывалась зависимость C_{sc} и C_{ss} от частоты сигнала.

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_p + C_B + \frac{C_n}{1 + \omega^2 \tau_n^2} + \frac{C_{ss}}{1 + \omega^2 \tau_{ss}^2}} \quad (1)$$

где τ_{ss} – время перезарядки ПС, τ_n – время жизни неосновных носителей, C_B – емкость ОПЗ в области обеднения и слабой инверсии, C_p – емкость ОПЗ в обогащении, C_n – емкость ОПЗ в области сильной инверсии [3].

Для схемы представленной на рис 1.а ток через пленку диоксида ванадия рассчитывается по формуле:

$$I = \frac{U}{\sqrt{(R_1 + R_v)^2 + (\omega C R_1 R_v)^2}} \quad (2)$$

В результате проведенного моделирования можно сделать следующие выводы:

1. При увеличении частоты сигнала подаваемого на структуру в исходной геометрии переключателя происходит уменьшение I_{max} (I_{max} , I_{min} – максимальное и минимальное значение тока при варьировании ψ_s рис.1.с), т. е. $I_{max} < I_k$. В результате чего переключатель не работает в данном диапазоне частот. Однако если уменьшить геометрические размеры переключателя, то I_{max} достигает I_k и переключение становится возможным. Необходимо отметить, что при частотах порядка 1 – 10 кГц переключатель имеет две рабочие точки переключения (рис.1с, кривая 1). При положительном и отрицательном значении поверхностного потенциала (рис.1с). Однако в результате перехода в более высокочастотную область, рабочая точка, характеризующая положительное значение поверхностного потенциала, сдвигается в область больших значений ψ_s , которая реально недостижима (рис.1с, кривая 2). В результате переключатель имеет одну рабочую точку.

2. Влиять на параметры переключателя можно при помощи варьирования длины и ширины алюминиевых контактов, а так же расстояния между ними.

Критический ток (I_k) будет выражаться следующей формулой:

$$I_k = j_k h d \quad (3)$$

где j_k – критическая плотность тока, приводящая к нагреву до температуры ФПМП, h – ширина контактов, d – толщина пленки.

Выражение для критического напряжения будет выглядеть следующим образом:

$$U_k = \rho j_k l \quad (4)$$

где ρ – удельное сопротивление пленки VO_2 , l – расстояние между контактами

Таким образом, из формулы (4) следует, что уменьшение межконтактного промежутка приведет к уменьшению критического напряжения переключения и наоборот. Так же варьируя ширину контактов и толщину пленки VO_2 , мы можем менять величину критического тока переключения (формула 3). Подбирая данные параметры можно выводить структуру в режим управляемого переключения в очень широком диапазоне частот, что делает ее перспективным элементом в микроэлектронике.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и Американского фонда гражданских исследований и развития (CRDF) № PZ-013-02.

Список публикаций:

- [1] Кулдин Н.А., Величко А.А. Фотоиндуцированное изменение электрических свойств структур $\text{Si} - \text{SiO}_2 - \text{VO}_2$ // Тез. докл. ВНКСФ-8. – Екатеринбург. – 2002. – С.252 – 255.
 [2] Величко А.А., Н.А. Кулдин, Г. Б. Стефанович, А. Л. Пергамент «Управление динамикой переключения в структуре $\text{Si-SiO}_2\text{-VO}_2$ » Письма в ЖТФ, т.29, в.12, с.49-53. (2003).
 [3] Зи С.// Физика полупроводниковых приборов. М.; Мир, 1984. Т. 1. 455с.

Кинетика накопления заряда неосновных носителей в транзисторных структурах с распределенным эмиттером.

Куликов Олег Николаевич

Кубанский государственный университет

oleg_kulikov@pochtamt.ru

Исследованиями было установлено, что одним из механизмов возникновения поверхностно-барьерной неустойчивости тока является накопление в области пространственного заряда (ОПЗ) коллектора транзисторной структуры с распределенным эмиттером неосновных носителей заряда (дырок) и последующая их рекомбинация [1].

Для описания кинетики этих процессов воспользуемся уравнением неразрывности для одномерного случая:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\partial j}{\partial x} = -\frac{p - p_0}{\tau} \quad (1)$$

Дифференцирование по координате производится по всей области пространственного заряда коллекторного перехода, приводит к уравнению:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -\frac{q}{\tau_p} + I \quad (2)$$

Общее решение уравнения (2) при начальном условии $q(t)=0$ в момент времени $t=0$ имеет вид:

$$p = \tau_p \frac{I}{e} \left(1 - \exp \left(-\frac{t}{\tau_p} \right) \right) \quad (3)$$

Ток I^- – в случае отсутствия p^+ -области определяется дырками, собираемыми с расстояния их дрейфа в полупроводнике [2,3]. В случае, если имеется p^+ -область этот ток определяется током эмиттерного p - n -перехода, и количественно описывается соотношением для вольтамперной характеристики.

Таким образом, установлена закономерность накопления неосновных носителей заряда (дырок) в ОПЗ коллектора транзисторной структуры с распределенным эмиттером.

Список публикаций:

- [1] Муравский Б.С., Рубцов Г.П., Григорьян Л.Р., Куликов О.Н. // Журнал радиоэлектроники 2000. № 10. <http://jre.cplire.ru/win/oct00/text.html>.
 [2] Муравский Б.С. // ФТТ. 1965. Т.7. № 1. С. 334-336.
 [3] Муравский Б.С. // ФТТ. 1965. Т.7. № 10. С. 3412-3413.

Прогнозирование электрофизических свойств соединений A^4B^6

Кургузова Елена Михайловна

Аверин Игорь Александрович

Пензенский Государственный Университет

Печерская Римма Михайловна, д.т.н

micro@diamond.stup.ac.ru

В настоящее время соединения A^4B^6 получили широкое применение в полупроводниковой технике. Особый интерес представляют собой соединения PbS, PbSe и PbTe.

Халькогениды свинца и твердые растворы на их основе являются полупроводниками с узкой запрещенной зоной E_g , причем ее величина определяется составом твердого раствора. Для PbS, PbSe и PbTe при температуре $T = 300K$ ширина запрещенной зоны соответственно составляет 0.41 эВ, 0.29 эВ и 0.32 эВ. Данные соединения имеют выраженную непараболичность основного экстремума валентной зоны. В свою очередь валентная зона состоит из двух подзон - легких и тяжелых дырок, разделенных небольшим по величине энергетическим зазором.

В настоящей работе разработана модель, позволяющая описать зависимость коэффициента термоЭДС α и концентрация электронов, легких и тяжелых дырок от энергии уровня Ферми, а также установить корреляцию между значениями коэффициента термоЭДС и концентрацией носителей заряда в случае смешанной проводимости на примере соединения сульфида свинца и твердых растворов сульфид-селенид свинца разного состава.

Поскольку зонная структура соединения сульфид-селенид свинца обладает отклонением валентной зоны от параболичности в дальнейших расчетах необходимо учитывать это отклонение β в следующем виде:

$$\beta = \frac{k_0 \cdot T}{E_g} \quad (1)$$

где k_0 - постоянная Больцмана, T - температура.

Для сульфида свинца данная величина составляет 0.162 эВ для температуры 300 К.

Коэффициент термоЭДС для одного типа носителей заряда определяется по формуле:

$$\alpha = \frac{k_0}{q} \cdot \left(\frac{L_1}{L_2} - \eta \right) \quad (2)$$

где L_1, L_2 - двухпараметрические интегралы Ферми, определяемые уравнениями (3 и 4), η - приведенный химический потенциал.

$$L_1 = \int_0^{\infty} \frac{\partial f_0}{\partial x} \cdot \frac{x^1 (x + \beta x^2)^1 dx}{(1 + 2\beta x)^0} \quad (3)$$

$$L_2 = \int_0^{\infty} \frac{\partial f_0}{\partial x} \cdot \frac{x^0 (x + \beta x^2)^1 dx}{(1 + 2\beta x)^0} \quad (4)$$

Концентрация носителей заряда выражается следующим образом

$$n = \frac{4\pi (2mk_0T)^{3/2}}{h^3} \cdot L_2 \quad (5)$$

С учетом наличия в твердых растворах сульфид-селенид свинца смешанной проводимости коэффициент термоЭДС. определяется формулой (6)

$$\alpha = \frac{C \cdot n \cdot \alpha_n + B \cdot p_l \cdot \alpha_{pl} + \alpha_{pt}}{C \cdot n + B \cdot p_l + p_t} \quad (6)$$

где n, p_l, p_t - концентрация электронов, легких и тяжелых дырок соответственно, $\alpha, \alpha_{pl}, \alpha_{pt}$ - коэффициент термоЭДС, обусловленный электронами, легкими и тяжелыми дырками соответственно. Зависимость коэффициента термоЭДС. для различного типа концентрации носителей заряда изображена на рис. 1.

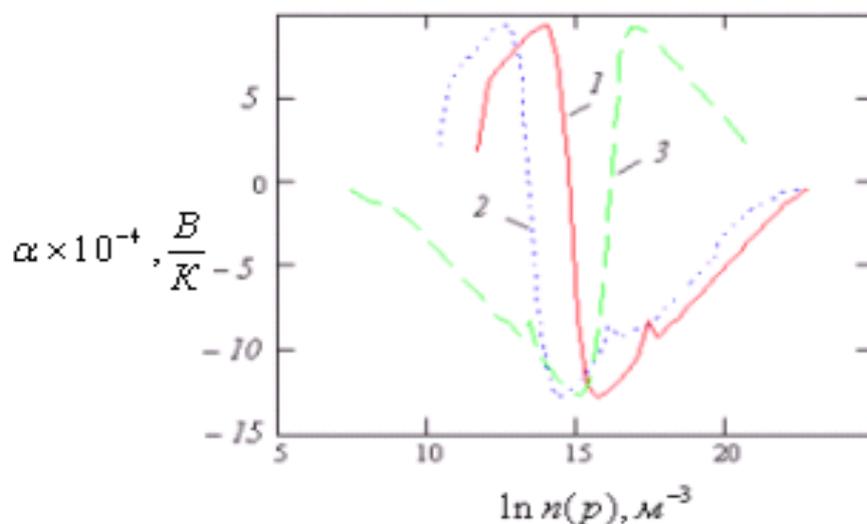


рис.1 Зависимость коэффициента термоЭДС. от концентрации носителей заряда в области смешанной проводимости:

Коэффициент термоЭДС, обусловленный электронами -1; легкими дырками -2; тяжелыми дырками - 3.

Таким образом, разработанная модель позволяет установить корреляцию между основными электрофизическими свойствами твердых растворов на основе соединений A^4B^6 для случая двухзонной Кейновской модели.

Синтез и исследование композиционных систем на основе микрокристаллов галогенидов серебра

Лапина Юлия Викторовна

Гаврилова Наталья Владимировна, Звиденцова Надежда Семеновна

Кемеровский Государственный Университет

Звиденцова Надежда Семеновна, к.х.н

luna@mosk.ru

Микрокристаллы галогенидов серебра (МК AgHal) сложной структуры типа «ядро-оболочка» (ЯО) и «двойная структура» (ДС) широко используются в современных фотографических материалах, так как они обладают рядом преимуществ, из которых можно отметить повышенную эффективность образования скрытого изображения, химической и спектральной сенсibilизации.

Технология создания композиционных систем указанного типа достаточно сложна и состоит из нескольких последовательных стадий. Вначале методом контролируемой двухструйной кристаллизации (КДК) синтезировались эмульсии с МК $AgBr_xI_{1-x}$ заданной формы, размера и состава. Структурометрические и дисперсионные характеристики микрокристаллов определялись электронно-микроскопическим методом. В работе использовались МК бромида и бромидида серебра октаэдрического габитуса (111), со средним эквивалентным размером $d = 0.4 - 1.0$ мкм. Концентрация иодида варьировалась в интервале 0 – 4 мол.%. Использование МК AgHal (111) в качестве ядерных обусловлено их повышенной вуалестойкостью и способностью к эффективной спонтанной сенсibilизации.

На второй стадии создания композиционных систем ядерные микрокристаллы подвергались химической сенсibilизации (ХС) с целью повышения светочувствительности

МК AgHal в собственной области поглощения. В работе исследовалась кинетика сернистой, сернисто-золотой и спонтанной сенсibilизации ядровых эмульсий. Спонтанная сенсibilизация заключается в термическом выдерживании фотоэмульсии в отсутствие фотографически активных добавок. Эффект спонтанной сенсibilизации объясняется модификацией поверхности МК AgBr (111) при изменении ионного равновесия в системе. Показано, что в процессе спонтанной сенсibilизации уровень светочувствительности микрокристаллов октаэдрического габитуса повышается в 3-4 раза по сравнению с примитивной эмульсией без существенного увеличения уровня вуали (D_0). Эмульсии ядрового типа с различной степенью химического созревания и оптимизированными фотографическими характеристиками далее использовались для создания сложных систем типа «ядро-оболочка», для этого на ядровые микрокристаллы проводилось наращивание оболочки AgBr.

Существует несколько способов создания оболочек на МК ядрового типа. В работе использовался метод физического созревания мелкозернистой эмульсии и метод КДК. Согласно первому способу, порции ядровой эмульсии с различной степенью химической сенсibilизации смешивались с заданным объемом мелкозернистой эмульсии, содержащей МК AgBr ($d = 0.1$ мкм). Физическое созревание эмульсии проводилось в термостатируемом реакторе ($T = 40-42^\circ\text{C}$), при непрерывном перемешивании, при различных значениях pBr ($pBr = -\lg [Br^-]$), в течение 60 мин. Наращивание оболочки происходит в данном случае способом оствальдовского созревания, при котором кристаллы мелкозернистой эмульсии растворяются, образуя равнотолщинные оболочки на ядровых МК. Нами подобраны оптимальные условия наращивания оболочек, толщина которых варьировалась от 0,03 мкм до 0,11 мкм. Сложная структура полученных систем доказана сенситометрическими исследованиями и подтверждена результатами электронно-микроскопического анализа. Наличие мелкозернистой фракции не выявлено, т.е. процесс оствальдовского созревания при выбранных условиях протекает достаточно эффективно. Показано, что при этом формируется четкая октаэдрическая огранка поверхности МК ЯО.

Согласно второму способу создания композиционных систем типа «ядро-оболочка», наращивание оболочки AgBr на ядровые микрокристаллы $AgBr_xI_{1-x}$ проводилось методом КДК. Использование данного метода создания систем «ядро-оболочка» имеет ряд особенностей. Показано, что более эффективное наращивание оболочки происходит при малой скорости подачи реагентов ($W = 0.4$ мл/мин), при низких температурах ($T^\circ = 40 - 43^\circ\text{C}$), в отсутствие растворителей, и, что особенно важно, при постепенном изменении величины pBr (от 3.0 до 1.6) в ходе синтеза. Указанные условия осаждения оболочки исключают возможность вторичного ядрообразования и обеспечивают формирование четкой октаэдрической огранки.

Поверхность оболочки композиционных систем типа $AgBr_xI_{1-x} / AgBr$ в дальнейшем подвергалась различной степени химической сенсibilизации. Исследовалась кинетика химической сенсibilизации полученных систем ЯО в режиме спонтанного созревания в зависимости от степени ХС ядра. Фотографические слои с МК ЯО подвергались экспонированию на сенситометре ФСР-41 ($t_{\text{эксп.}} = 0,05$ сек, $T_{\text{цв.}} = 5500$ К) и последующей химико-фотографической обработке. Для поверхностного проявления использовался метол - гидрохиноновый проявитель УП-2. Для глубинного проявления использовался проявитель на основе УП-2 с добавлением тиосульфата натрия ($C = 1-5$ г/л) или иодидом калия ($C = 1$ г/л). Результаты сенситометрических исследований показали, что внутренние центры чувствительности, созданные на границе раздела ядра и оболочки, оказывают существенное влияние на фотографические свойства поверхности МК ЯО. Чем выше степень химической сенсibilизации ядра, тем ниже поверхностная чувствительность оболочки. Таким образом, захват фотоиндуцированных электронов происходит на границе раздела ядра и оболочки.

Одной из проблем исследования систем «ядро-оболочка» является, в ряде случаев, повышенный уровень глубинной вуали $D_0^{\text{гл}}$. С целью снижения $D_0^{\text{гл}}$ и оптимизации фотографических характеристик данных систем использовались различные стабилизаторы и антивуаленты (тетраазаинден, фенилмеркаптотетразол, с-соль, КФ-4026). Показано, что

указанные вещества при оптимально подобранной концентрации могут быть использованы как на стадии осаждения оболочки на ядерные микрокристаллы, так и на стадии проявления фотографических слоев.

Таким образом, в результате проведенных исследований выявлены отличия сенситометрических характеристик систем «ядро-оболочка» в зависимости от способа их создания и степени химической сенсibilизации ядра и оболочки.

Далее в работе исследовался процесс спектральной сенсibilизации систем «ядро-оболочка» с варьируемым содержанием иодида в ядре. В качестве спектрального сенсibilизатора использовался краситель № 20 (3,3'-диэтилтиакарбоцианиниодид, $\lambda_{\text{адс.}} = 584$ нм) в интервале концентраций от $4 \cdot 10^{-6}$ до $256 \cdot 10^{-6}$ М/М Ag⁰. Определен оптимальный диапазон концентраций вводимого сенсibilизатора. Показана принципиальная возможность создания двойного изображения в разных спектральных диапазонах.

Строение валентной зоны и спектральные характеристики

моносилицидов рутения и осмия

Левицкая Елена Владимировна

Преславцева Наталия Сергеевна

Воронежский государственный Университет

Преславцева Наталия Сергеевна к.ф.-м. н

phssd18@main.vsu.ru

В данной работе представлены результаты прямого теоретического исследования электронной структуры объемных RuSi и OsSi, кристаллизующихся в структурный тип CsCl (пространственная группа – Pm3m) с параметрами решетки $a=0.2914$ нм и 0.2963 нм, соответственно. Моносилициды рутения и осмия имеют две кристаллические модификации типа FeSi и CsCl, принадлежащие к кубической сингонии. Соединения в структуре FeSi стабильны при низких и CsCl – при высоких температурах. Широкий спектр применения моносилицидов, кристаллизующихся в CsCl, в микроэлектронике обусловил высокий исследовательский интерес к этим соединениям. Близость параметров решеток и изоструктурность OsSi и RuSi позволяет установить закономерности формирования электронного строения. Для этого были рассчитаны зонная структура, полная и частичные плотности электронных состояний, рентгеновские эмиссионные спектры различных серий и фотоэлектронные спектры для широкого спектра возбуждающей энергии ($h\nu=12-1486$ eV). Расчет электронной структуры кристалла проводился в локальном приближении функционала плотности с использованием аппроксимации обменного корреляционного потенциала. Энергетический спектр вычислялся самосогласованным методом линейризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) на базисе 123 ЛППВ, причем в разложении базисной функции по сферическим гармоникам удерживались слагаемые вплоть до $l=7$. При построении кристаллического потенциала применялось muffin-tin (MT) приближение, в котором элементарная ячейка объемного кристалла разбивается на две области, каждая из которых характеризуется своим видом потенциала и базисной функции. Радиусы MT сфер атомов Si выбраны 0.1276 и 0.1285 нм, соответственно в RuSi и OsSi и для атомов металла MT радиусы составили 0.1323 нм в обоих соединениях. Сопоставление полученных результатов с экспериментальными данными по фотоэлектронной и рентгеновской эмиссионной спектроскопии показало хорошее соответствие данных.

На основе проведенного исследования можно сделать следующие выводы.

1. Ширина валентной зоны RuSi и OsSi составляет 13.53 eV и 13.95 eV, соответственно. Валентная зона сформирована из семи энергетических зон. Зоны у дна

валентной зоны в области от -15 eV до -9 eV отражают *s*-состояния Si, от -7 eV до -6 eV – *d*-состояния Me и *p*-состояния Si. *d*-состояния Si преобладают в прифермиевской области.

2. Уровень Ферми пересекают три энергетические зоны: пятая, шестая и седьмая по счету от дна валентной зоны. Пятая и шестая энергетические зоны пересекают уровень Ферми в окрестности точки R и являются зонами свободных состояний в этой окрестности. Седьмая зона проходит через уровень Ферми в области точки R по направлению ГР и является зоной частично заполненной. Пятая и шестая энергетические зоны формируют электронные листы поверхности Ферми, а седьмая зона – дырочный лист поверхности Ферми.

3. *K*- и *L₁*- спектры Si, согласно дипольным правилам отбора отражают распределение электронов *p*-симметрии, имеют две достаточно интенсивные особенности при -5.8 и -3.0 eV. В структуре *L_{2,3}*-полос OsSi и RuSi наблюдаются три характерных пика. Главный максимум при энергии связи 9.9 eV образован *s*-состояниями Si. Известно, что уширение пика в этой области в кремнии и его соединениях является одним из признаков существования ковалентной связи Si–Si. Как показал расчет *L_{2,3}*-спектров OsSi и RuSi, полученные значения полуширины главного максимума (3.1 eV) значительно меньше, чем в чистом кремнии и дисилицидах, что говорит об отсутствии в моносилицидах связей типа Si–Si. Особенность при -5.6 eV и второй по интенсивности пик при -2.0 eV обусловлены состояниями *s*- и *d*-симметрии Si.

4. Анализ фотоэлектронных спектров показал, что при малых ($h\nu=12–50$ eV) и очень больших ($h\nu=1486$ eV) энергиях возбуждения спектры обусловлены *d*-состояниями Me, а при промежуточных энергиях ($h\nu=70–170$ eV) состояния Si преобладают над состояниями Me *d*-симметрии. В этом случае электроны Si *p*-симметрии формируют спектры в области главного максимума, а *s*-состояния – у дна валентной зоны.

Влияние лазерного облучения на механические свойства тонких пленок

Лежнев Денис Владимирович

Пензенский государственный университет

Печерская Римма Михайловна, д.т.н

micro@diamond.stup.ac.ru

В настоящее время применение тонких пленок обширное и разнообразное:

- чувствительные элементы различного рода датчиков;
- тонкопленочные элементы микроплат и гибридных микросхем;
- упрочняющие и декоративные покрытия;
- проводящие коммутационные дорожки и контактные площадки в дискретных и интегральных полупроводниковых приборах;
- тонкопленочные покрытия элементов оптических систем лазеров;
- световые индикаторы и многое другое.

Поэтому требования, предъявляемые к характеристикам, как самих пленок, так и тонкопленочных структур весьма высоки. Характеристики тонких пленок и тонкопленочных структур определяются не только исходными свойствами материалов каждого слоя, но и методом их получения, а также последующей обработкой. В частности, на такую характеристику как адгезия особенно сильно сказывается влияние переходных слоев.

Получить высокую адгезию между твердыми телами при простом их соприкосновении невозможно. Преимущественно адгезия пленки с подложкой осуществляется за счет механической связи, однако повышение адгезии достигается за счет физических связей под действием сил Ван-дер-Ваальса и за счет химических связей, возникающих в результате

поверхностной и взаимной диффузии, диффузионного сплавления и т.п. Таким образом, для достижения высокой адгезии необходимо внешнее воздействие, например, импульсное лазерное излучения «допорогового» уровня, т.е. не приводящее к разрушению структуры пленки.

При воздействии импульсного лазерного излучения «допорогового» уровня на тонкие пленки и тонкопленочные структуры происходит накопление, частичный отжиг и перераспределение точечных подвижных дефектов, формирование статической периодической дефектно-деформационной структуры, а также изменение деформационного поля за счет термонапряжений.

Положительные эффекты могут быть достигнуты за счет трех одновременно протекающих процессов:

- акустостимулированная диффузия атомов в зернах поликристаллических слоев;
- акустостимулированная диффузия атомов по межзерновым границам;
- акустостимулированная разрушение нестабильных химических соединений.

Импульсное лазерное облучение приводит к уменьшению энергии активации и увеличению коэффициента диффузии, усилению процесса испарения примесей продиффундировавших с поверхности в глубь, совершенствованию структуры поверхностного слоя и т.п. В результате кинетических процессов взаимодействия контактирующих слоев переходный слой является многофазным. Он включает в себя механическую смесь компонентов контактирующих слоев, интерметаллические соединения, неидеальные твердые растворы и химические соединения, образующиеся при взаимодействии адсорбированных на поверхности атомов с напыленным на эту поверхность веществом следующего слоя.

Таким образом, с помощью воздействия импульсного лазерного излучения «допорогового» уровня улучшаются как адгезионные свойства тонких пленок, так и стабильность их основных характеристик при значительных колебаниях температуры и в течении длительного срока эксплуатации.

Возможности метода многократного рассеяния при описании рентгеновских спектров поглощения кристаллов KNO_3 И $NaNO_3$

Лемешко Михаил Петрович

Ростовский Государственный Университет

Ведринский Ростислав Викторович, д.ф.-м.н

Vptv@narod.ru

В спектроскопии твердого тела особую сложность представляют расчеты рентгеновских спектров поглощения (РСП) ионных кристаллов, которые содержат далеко расположенные друг от друга островные группы атомов, связанных ковалентными силами. Из-за сильно неоднородного потенциального рельефа muffin-tin (MT) приближение не описывает хорошо одноэлектронный потенциал таких кристаллов, а более точные методы расчета, основанные на численном решении уравнения Шредингера методом сеток, требуют огромного машинного времени и поэтому труднореализуемы. В данной работе выявлены возможности MT приближения для расчета К РСП катионов и анионов в кристаллах KNO_3 и $NaNO_3$, и методом численного эксперимента исследованы механизмы формирования околпороговой тонкой структуры спектров. При расчете всех спектров для каждого кристалла использовался один и тот же полуэмпирический MT потенциал [1] и единый метод учета остальной дырки. Расчеты проводились полным методом многократного рассеяния в формализме функций Грина [2] с

использованием программы, разработанной в РГУ доц. А.А. Новаковичем. Было проведено сравнение полученных спектров с экспериментальными данными из работ [3,4,5]. Необходимые для расчетов структурные данные были взяты из работ [6,7].

Расчеты показали, что в околопороговых областях НК и ОК РСР есть яркие линии, обусловленные переходами электронов в свободные состояния NO_3 групп, содержащих поглощающие атомы. Эти линии слабо зависят от параметров МТ потенциала и хорошо согласуются с экспериментом. Нами показано, в ОК- и НК-спектрах есть линии, обусловленные переходами $1s$ электронов соответствующих атомов в состояния NO_3 группы A_2'' симметрии, в состоянии E_1' симметрии и A_1' симметрии, которые хорошо воспроизводятся в расчете. В то же время в околопороговых областях экспериментальных НК-спектров есть яркие линии, которые не воспроизводятся в расчете. Показано, что эти линии обусловлены переходами в энергетические зоны, формирующиеся в кристаллах из состояний NO_3 групп. Естественно предположить, что атомы щелочных металлов должны слабо влиять на формирование таких зон. Однако, расчеты показали, что при больших радиусах атомных сфер щелочных металлов, возникает расщепление в НК РСР, в то время как при умеренных радиусах расщепление не возникает ни при каких значениях параметров МТ модели. Некоторое улучшение согласия расчета и эксперимента для НК РСР не компенсируется ухудшением согласия для ОК РСР, кроме того, в случае больших радиусов атомных сфер, расчетные спектры очень неустойчивы при изменении параметров МТ потенциала. Мы считаем, что полученные результаты говорят о том, что зонное расщепление в кристаллах, безусловно, имеет место, но на структуру возникающей полосы очень сильно влияет рельеф потенциала в области между ионами щелочных металлов и NO_3 – группами, который сферически не симметричен относительно центров атомов Na и, следовательно, не может быть правильно описан в рамках МТ модели.

Другим вопросом, исследованным в работе, был вопрос о влиянии на спектры остовных дырок, возникающих при фотоионизации. Эксперимент показывает, что линии в НК и ОК РСР, обусловленные переходами на одни и те же свободные состояния NO_3 -группы, имеют очень близкие энергии, хотя остовные дырки возникают при формировании этих спектров на разных атомах. Расчет, проведенный нами в традиционной модели учета остовой дырки, в рамках которой на валентную оболочку ионизируемого атома добавляется один электрон, экранирующий дырку, привел к сдвигу друг относительно друга линий в НК и ОК РСР, обусловленных переходами на одни и те же состояния. Мы учли, что в рассматриваемых ионных кристаллах экранирующий электрон может перейти лишь с других атомов NO_3 -группы, содержащей ионизируемый атом. Для учета этого расчет был проведен для уменьшенных чисел заполнения валентных оболочек этих атомов. Результаты, полученные в такой уточненной модели учета остовой вакансии, оказались в хорошем согласии с экспериментом.

Список публикаций:

- [1] R.V. Vedrinski, V.L. Kraizman et al., *J. Phys: Cond. Mat*, 10, 9561-9580, 1998.
- [2] Р.В. Ведринский, А.А. Новакович, *Физ. мет. и металловедение*, 39, 7, 1975
- [3] В.Н. Сивков, *Докторская диссертация, СПбГУ*, 2003
- [4] Ederer D.L., *Phys. Rev. Lett.* 13, 760-762, 1964.
- [5] Акимов В.Н., Виноградов А.С., *Опт и спектр*, 82, №3, 360-365, 1997 г.
- [6] Holden J.R., Dickinson C.W., *Journal of Physical Chemistry*, 79, 249-256, 1975.
- [7] Antee M., Nurmela M., Suortti P., Jaervinen M., *J. Appl. Cryst.*, 22, 261-268, 1989.

Применение фрагментарной модели для анализа структуры легированных стекол на основе SiO₂

Лихач Надежда Ивановна

Воронежский Государственный Университет

Алейникова Ксения Борисовна, к.ф.-м.н

zinchenko@phys.vsu.ru

Цель работы – применение фрагментарной модели [1] для анализа атомной структуры легированного кварцевого стекла.

В качестве образца для исследования выбран светофильтр, характеризующийся однородной плотностью распределения примеси по объему. Проведенный спектральный анализ показал достаточно высокое содержание цинка в исследуемом образце.

Для получения информации о структуре исследуемого стекла, мы опирались на результаты рентгендифракционных экспериментов. При проведении экспериментов использовали монохроматизированные на вторичном пучке медное (монохроматор LiF) и серебряное (графитовый монохроматор) излучения. Съёмки проводили на модифицированном автоматическом дифрактометре ДРОН-3М с пошаговой регистрацией интенсивности (шаг 0,2°, время накопления – 15сек). Мягкое медное излучение использовали для выявления тонкой структуры диффузных максимумов, содержащей дополнительную информацию об атомной структуре стекла. Обработку экспериментальных кривых интенсивности для получения интерференционной функции проводили в соответствии с [2]. Хорошая корреляция интерференционных функций, полученных на разных излучениях, позволила «сшить» обе кривые в точке 7,6 Å⁻¹, продлив тем самым информативную «медную» интерференционную функцию до 13,82 Å⁻¹. На основе «сшитой» интерференционной функции проводили расчет функции радиального распределения атомов (ФРРА) исследуемого стекла в соответствии с [3]. Полученная кривая позволяет интерпретировать семнадцать координационных сфер в области упорядочения до 10 Å.

Для анализа структуры исследуемого стеклообразного образца была применена фрагментарная модель, в основе которой лежит предположение о том, что в атомной структуре стекол с ковалентным типом связи присутствуют фрагменты кристаллов, химический состав которых не противоречит составу исследуемого стекла. При этом не исключается некоторая деформация связей, существенно не изменяющая энергетику связей. Основные преимущества фрагментарной модели заключаются в следующем:

1. поскольку построение модели базируется на данных о реальной структуре кристаллических аналогов исследуемого стекла, нет необходимости в последующей минимизации по энергии, обязательной для всех моделей, использующих случайные упаковки частиц.

2. фрагментарная модель позволяет найти вклад каждого типа межатомных расстояний в ту или иную координационную сферу.

На основании кристаллоструктурных данных всех кристаллов SiO₂ были рассчитаны модельные ФРРА, представляющие собой радиальные сечения сферически симметричных функций межатомных расстояний, свойственных той или иной кристаллической модификации. Так как экспериментальная ФРРА имеет область упорядочения не менее 10 Å, при построении модели межатомные расстояния для всех кристаллических фаз рассчитывались до 15 Å, что соответствует включению в расчет 6000-8000 атомов. Показано, что первые существенные различия между модельными ФРРА разных кристаллов - аналогов имеют место в четвертой координационной сфере ($r \approx 3-3,5\text{Å}$). Следовательно, выводы о наличии в a-SiO₂ тех или иных структурных фрагментов можно делать только на основании сравнения экспериментальной и

модельных ФРРА в области средних и дальних координационных сфер. Исключение составляет кристалл стишовит, единственный из кристаллов SiO_2 , имеющий октаэдрическую координацию. Первый максимум стишовита сдвинут в сторону больших значений r (1.8 Å), по сравнению с первыми максимума других кристаллов – аналогов (1.62 Å).

При сравнении экспериментальной ФРРА с модельными мы обращали внимание только на две позиции: положения максимумов и их относительную наполняемость. Если максимумы модельной и экспериментальной ФРРА в пределах ошибки совпадают во всей области упорядочения, то можно утверждать, что в стекле присутствуют структурные фрагменты кристалла-аналога, чьи межатомные расстояния легли в основу построения модели. Присутствие на экспериментальной кривой дополнительных максимумов (по сравнению с ФРРА кристалла – аналога, наличие фрагментов которого в данном стекле установлено) говорит о присутствии в структуре стекла фрагментов других кристаллических фаз.

Расщепление первого максимума экспериментальной ФРРА свидетельствует о присутствии в структуре исследуемого стекла фрагментов как минимум двух кристаллических аналогов, различающихся по положениям первого максимума. Детальное сравнение экспериментальной и расчетных ФРРА позволило сделать вывод о присутствии в структуре стекла фрагментов кристаллов альфа - кристобалита и стишовита.

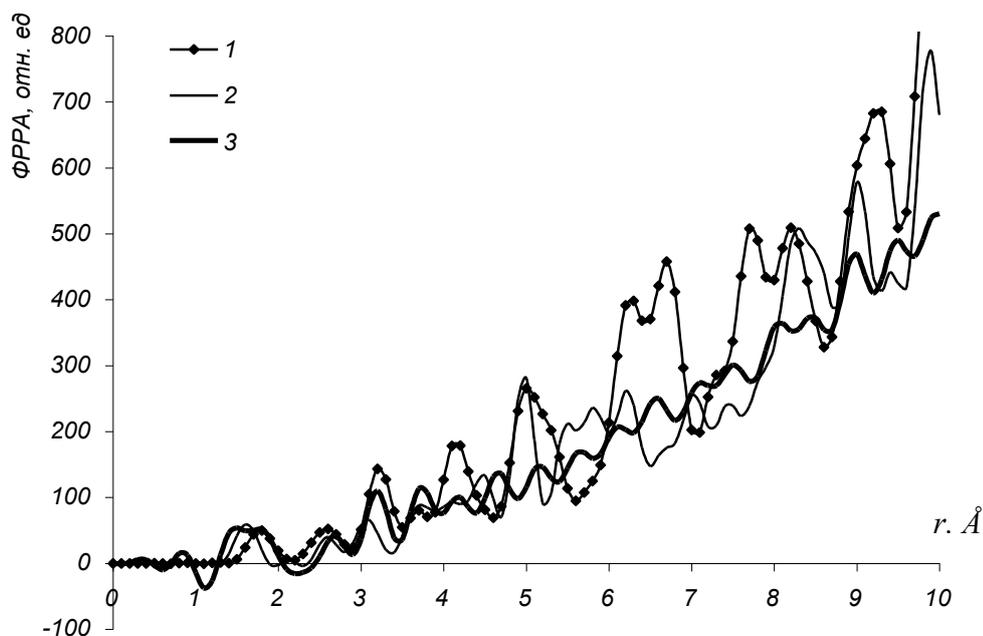


рис.1 Модельные ФРРА стишовита (1), альфа – кристобалита (2) и экспериментальная ФРРА легированного стекла на основе SiO_2 (3).

Список публикаций:

1. Алейникова К.Б., Перин Ю.А., Лесовой М.В.// Доклады АН. Физическая химия, 1993, т. 329, № 3, с. 308 - 310
2. Набитович И.Д., Стецев Я.И., Волощук Я.В.// Кристаллография.1967.Т.12. вып.4. С.584-590.
3. Вайнштейн Б.К.// Кристаллография. 1957. Т.2. №1. С. 29-37.

Низкотемпературные фонон-магнонные аномалии в $TiOCl$

Лукоянов Алексей Владимирович

Некрасов Игорь Александрович

Уральский Государственный Технический Университет – УПИ

Институт Физики Металлов УрО РАН

Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н

Lukoyanov@optics.imp.uran.ru

Открытие явления ВТСП и последующее бурное развитие данной области физики низких температур положили начало особому разделу квантовой теории магнетизма – квантовому магнетизму низкоразмерных спиновых магнетиков. В настоящее время активно исследуются одно- и двухмерные, квазидвухмерные магнетики, а также магнитные переходы в них.

Одним из соединений класса низкоразмерных магнетиков является $TiOCl$. Впервые соединение $TiOCl$ привлекло внимание экспериментаторов и теоретиков как одномерный магнетик со спиновым переходом Пайерлса при $T_{SP} = 67K$ [1], а также сложными спектрами рамановского рассеяния [2] и аномальным поведением спиновой восприимчивости [1]. Экспериментальные данные по рамановскому рассеянию показывают наличие критической температуры $T = 135K$, при которой влияние фононной системы кристалла максимально, что приводит к значительному уменьшению спиновой восприимчивости $TiOCl$ [1,2].

В данной работе была рассчитана электронная структура $TiOCl$ методом $LDA+U$ [4] с помощью пакета компьютерных программ $TB-LMTO-ASA$ версии 47. Соединение $TiOCl$ (группа симметрии $Pm\bar{3}n$) образовано октаэдрами, состоящими из четырех атомов кислорода и двух атомов хлора. Октаэдры образуют слои в плоскости bc . При этом все атомы хлора располагаются на внешней поверхности, хорошо отделяя слои друг от друга. Параметр обменного взаимодействия Хунда $J_H = 0,86эВ$ был вычислен из первых принципов. Параметр прямого кулоновского взаимодействия U был выбран равным $2,3эВ$. Оказалось, что $3d^1$ электрон Ti локализуется почти полностью на d_{xy} орбитали, которые напрямую перекрываются, образуя антиферромагнитные (АФМ) цепочки в направлении b . Параметр обменного взаимодействия ($LEIP$) [4] в АФМ цепочке был получен $J = 207K$ в сравнении с $J_1 = 21K$ между атомами Ti соседних цепочек. Что подтверждается значениями интегралов перескока в цепочке и между цепочками $t_{Ti-Ti} = 0,19эВ$ и $t^1_{Ti-Ti} = 0,02эВ$. Значение U и полученные значения J и t удовлетворяют соотношению $J \cong t_{Ti-Ti}^2 / U$ АФМ модели Гайзенберга.

Чтобы учесть фононные искажения реального кристалла для A_{1g} моды (247 см^{-1}) спектра рамановского рассеяния в оболочечной модели были рассчитаны максимальные смещения атомов [2]. Величина их составила порядка 5 % постоянной решетки, при этом изменяются только z -координаты атомов, а ячейка удваивается в направлении b . Электронная структура такой кристаллической решетки существенного изменения не претерпевает, но картина обменных взаимодействий сильно изменяется. Обмен вдоль искривленной АФМ цепочки остался почти тем же, но выделились пары между соседними цепочками с чередующимися короткими и длинными связями $Ti-Ti$. Обменный параметр $J_1 = 118K$ для коротких связей и $J_2 = 31K$ для длинных. Так АФМ цепочки в случае максимального отклонения, вызванного модой A_{1g} , образуют квазидвухмерные магнитные плоскости.

При температуре $135K$ фононная мода A_{1g} наиболее сильна в $TiOCl$ и предполагается, что фонон-магнонные взаимодействия, приводящие к образованию квазидвухмерной магнитной структуры в плоскости bc ответственны за аномальное уменьшение спиновой восприимчивости в этой области температур.

Список публикаций:

[1] Seidel A. et al., *Phys. Rev. B*, **67**, 020405-1 (2003).

[2] Lemmens P. et al., *cond-mat 0307502*; G. Caimi et al., *cond-mat 0308273*.

[3] Anisimov V.I., Aryasetiawan F. and A.I. Lichtenstein, *J.Phys.:Condens.Mat.*, **9**, 767 (1997).

Магнитный момент $3d$ –металла в интерметаллидах $GdTiGe$ и $GdTiSi$

Лукоянов Алексей Владимирович

Некрасов Игорь Александрович, Князев Юрий Валентинович

Морозкин Александр Владимирович, Кузьмин Юрий Иванович

Уральский Государственный Технический Университет – УПИ

Институт Физики Металлов УрО РАН

Московский Государственный Университет им. Ломоносова

Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н

Lukoyanov@optics.imp.uran.ru

Значительный интерес вызывают стабильные тройные интерметаллиды RTX – типа (R – редкоземельный металл (РЗМ), T – переходный $3d$ металл, X – p элемент IV группы), которые активно изучаются в последние годы [1]. Установлено, что магнитный момент T ионов мал вследствие гибридизации p состояний X элемента с $3d$ состояниями переходного металла T , что подавляет процесс возникновения магнитного момента иона переходного металла. Конкурирующим процессом является косвенное взаимодействие магнитного момента f оболочки РЗМ иона с магнитным моментом d оболочки переходного металла [2]: значительный магнитный момент f оболочки приводит к подмагничиванию $5d$ оболочки РЗМ, которые вследствие гибридизации вызывают намагничивание $3d$ электронов переходного металла.

Тройные соединения $GdTiSi$ и $GdTiGe$ кристаллизуются в однофазную тетрагональную структуру $CeFeSi$ – типа (пространственная группа $P4/nmm$) с параметрами решетки $a = 0,4064$ нм, $c = 0,7712$ нм ($GdTiGe$); $a = 0,4029$ нм, $c = 0,7613$ нм ($GdTiSi$).

В данной работе электронная структура $GdTiSi$ и $GdTiGe$ была рассчитана методом $LSDA+U$ [3] в пакете компьютерных программ $TB-LMTO-ASA$ версии 47. Параметры расчета (атомные радиусы и вычисленные из первых принципов значения параметра кулоновского взаимодействия U и хундовский обменный параметр J), а также магнитные моменты на ионах Gd и Ti представлены в таблице.

Соединение	Атомы	R, а.е.	μ , μ_B	U, эВ	J, эВ
$GdTiGe$	Gd	3,67	6,51	6,7	0,7
	Ti	3,09	-1,19	4,6	0,7
	Ge	2,88	-	-	-
$GdTiSi$	Gd	3,70	6,50	7,1	0,7
	Ti	3,07	-1,28	3,9	0,7
	Si	2,70	-	-	-

Таким образом, величина магнитного момента Ti составила $-1,28 \mu_B$ и $-1,19 \mu_B$ в $GdTiSi$ и $GdTiGe$, соответственно. Откуда явно следует, что эффект намагничивания $3d$ оболочки Ti антиферромагнитно большому моменту f оболочки Gd в интерметаллидах $GdTiSi$ и $GdTiGe$

определяется главным образом косвенным взаимодействием $f(Gd) - d(Ti)$. Изменение компоненты X (Ge или Si) несущественно влияет на его величину.

Список публикаций:

[1] Skorek G. et al., *J.Phys.:Condens.Mat.*, **13**, 6397 (2001).

[2] M.S. Brooks, O. Eriksson and B. Johansson, *J.Phys.:Condens.Mat.*, **1**, 5861 (1989).

[3] V.I. Anisimov, F.Aryasetiawan and A.I. Lichtenstein, *J.Phys.:Condens.Mat.*, **9**, 767 (1997).

Релаксация напряжений и вязкость массивного металлического стекла $Pd_{40}Cu_{30}Ni_{10}P_{20}$ в условиях изохронного нагрева

Ляхов Сергей Александрович

Липчев Сергей Николаевич

Воронежский государственный педагогический университет

Хоник Виталий Александрович

lsa@vspu.ac.ru

В последнее время возрос интерес исследователей к так называемым массивным металлическим стеклам (МС), приготовляемым в виде пластин толщиной до нескольких сантиметров. Этот интерес обусловлен как чисто научными причинами, связанными с фундаментальными вопросами физики некристаллического состояния, так и с перспективами практического использования массивных МС. Вместе с тем, физические свойства массивных МС изучены очевидно недостаточно. В частности, это относится к явлениям механической релаксации, возникающим при термообработке нагруженных образцов. Экспериментальное исследование и интерпретация кинетики релаксации представляет собой актуальную научную задачу. Такие исследования позволяют, в частности, рассчитать сдвиговую вязкость, являющуюся важнейшей характеристикой атомной подвижности.

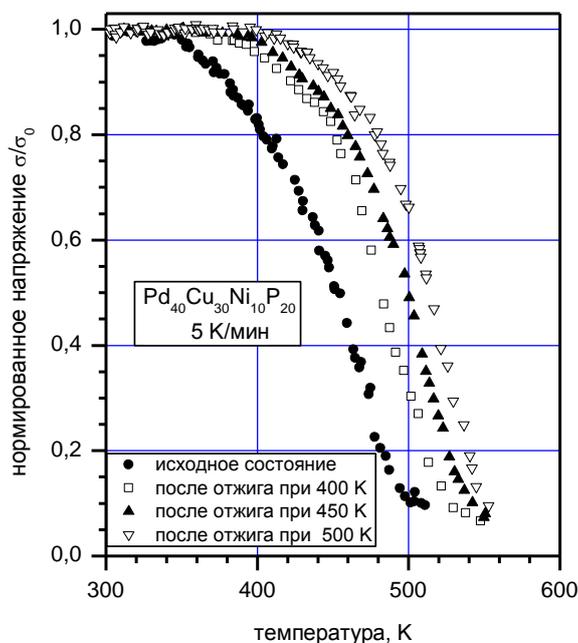


рис. 1. Кривые изохронной релаксации напряжений массивного МС $Pd_{40}Cu_{30}Ni_{10}P_{20}$ при скорости нагрева 5 К/мин в исходном состоянии и после различных термообработок.

В настоящей работе изучалась релаксация напряжений массивного МС $\text{Pd}_{40}\text{Cu}_{30}\text{Ni}_{10}\text{P}_{20}$ в условиях линейного нагрева. Были поставлены следующие задачи: а) измерение релаксации растягивающих напряжений при различных скоростях нагрева и напряжениях и б) интерпретация кинетики релаксации.

Температурная зависимость нормированного напряжения исследуемого МС в исходном состоянии и после предварительных термообработок при скорости нагрева 5 К/мин показана на рис. 1. Релаксация напряжений в исходных образцах начинается в области 350 К и заканчивается вблизи 550 К. Предварительная термообработка сдвигает релаксационные кривые в область высоких температур, хотя в любом случае полная релаксация напряжений достигается ниже температуры стеклования (которая по данным дифференциальной сканирующей калориметрии составила примерно 555 К, как показано стрелкой на рис. 2). Повышение (понижение) скорости нагрева до 10 К/мин (1 К/мин) вызывает примерно параллельный сдвиг релаксационных кривых на 10 – 15 К в сторону высоких (низких) температур. Повышение начального напряжения от 250 до 450 МПа вызывает небольшое (на 3–6 К) смещение релаксационных кривых в сторону низких температур, указывая на малую величину активационного объема релаксации.

В рамках модели направленной структурной релаксации по специальному алгоритму был численно восстановлен кажущийся энергетический спектр необратимой структурной релаксации, ответственной за релаксацию напряжений. Этот спектр, далее, был использован для расчета температурной зависимости сдвиговой вязкости. Результаты расчета показаны сплошной кривой на рис. 2. Кружки на этом рисунке дают ту же зависимость, определенную путем дифференцирования экспериментальной кривой ползучести того же МС при той же скорости нагрева. Как видно, результаты расчета хорошо согласуются с экспериментальными значениями сдвиговой вязкости. Этот факт свидетельствует о том, что, во-первых, за релаксацию напряжений ответственна необратимая структурная релаксация с распределенными энергиями активации и, во-вторых, модель направленной структурной

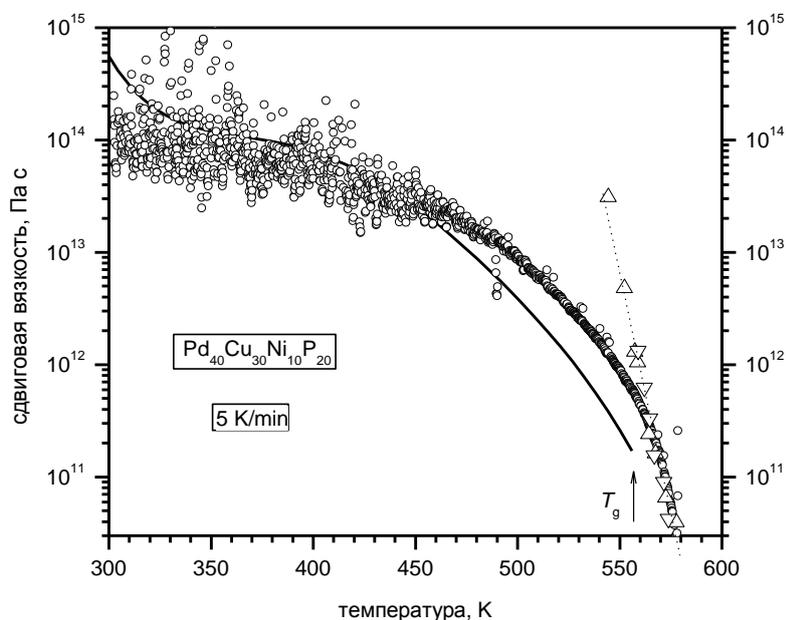


рис. 2. Температурная зависимость сдвиговой вязкости МС $\text{Pd}_{40}\text{Cu}_{30}\text{Ni}_{10}\text{P}_{20}$, восстановленная из кинетики релаксации напряжений (сплошная кривая), и рассчитанная (кружки) по результатам измерений ползучести. Треугольники дают литературные данные по квазиравновесной вязкости МС близких химических составов.

релаксации дает правильное описание кинетики структурной релаксации и обусловленной ей релаксации напряжений.

Треугольники на рис. 2 показывают литературные данные по квазиравновесной вязкости массивных МС близких химических составов. Как видно, выше температуры стеклования наши данные совпадают с линией квазиравновесной вязкости. Ниже температуры стеклования вязкость, измеряемая в режиме изохронного нагрева, меньше ее квазиравновесного значения. Отклонение изохронной вязкости от квазиравновесной кривой имеет место при вязкостях, меньших примерно 10^{12} Па·с. Последнее значение обычно и принимается за сдвиговую вязкость, соответствующую температуре стеклования.

Исследование аналитической структуры функции Грина многоатомных систем

Майорова Мария Александровна

Ростовский Государственный Университет

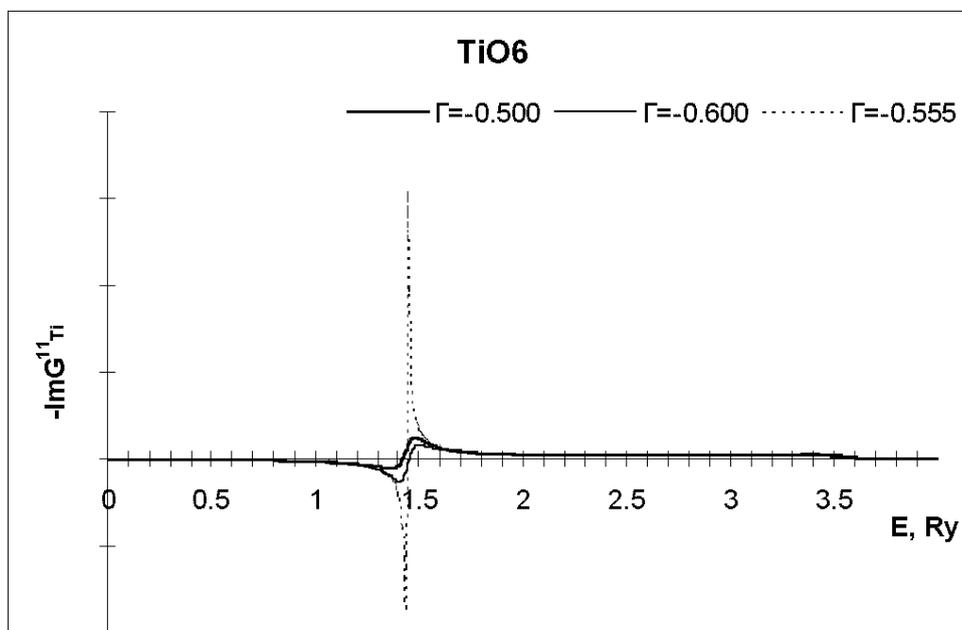
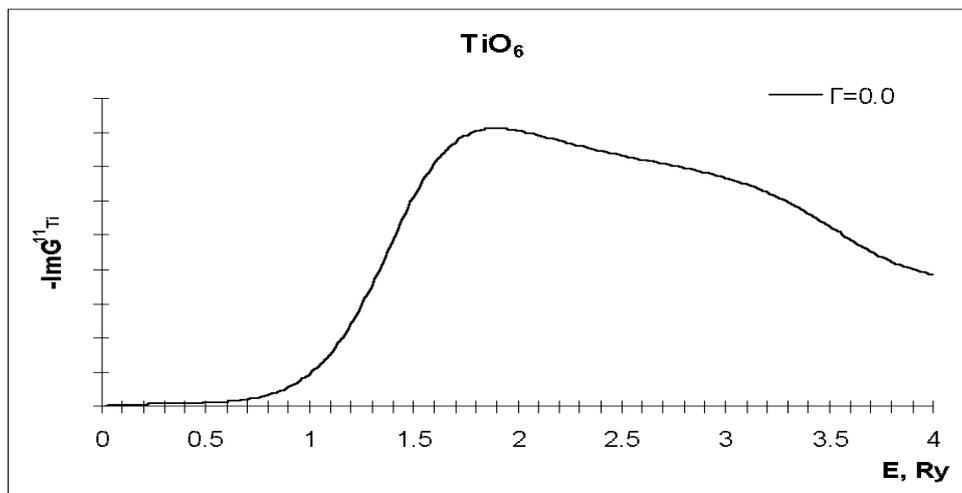
Ведринский Ростислав Викторович, док. ф-м. н

mariam@phys.rsu.ru

Одним из распространенных методов исследования электронной структуры многоатомных систем является метод полного многократного рассеяния, использующий muffin-tin (MT) приближение для одноэлектронного потенциала [1]. Рассчитав функцию Грина в таком потенциале, можно получить локальные парциальные плотности электронных состояний (ЛППС), пропорциональные мнимой части этой функции, записанной в представлении «номер атома – орбитальный момент». Расчеты показывают, что при небольших энергиях над средним межатомным потенциалом (MT нулем) в области непрерывного электронного спектра ЛППС часто имеют более или менее выраженные максимумы резонансного типа. Можно предположить, что они указывают на существование полюсов функции Грина на нефизическом листе комплексной плоскости энергии вблизи вещественной оси. Нами показано, что решение системы алгебраических уравнений для функции Грина в представлении «номер атома – орбитальный момент» при отрицательных мнимых добавках к энергетическому параметру функции Грина позволяет эффективно осуществлять аналитическое продолжение этой функции на нефизический лист. На примере функции Грина, рассчитанной для молекулы CO, установлено, что результаты, полученные на нефизическом листе, сходятся по мере увеличения учитываемых при расчете орбитальных моментов рассеивающихся электронов не хуже, чем на вещественной оси энергии. Предложена методика обработки расчетных данных, позволяющая определять положение полюсов и вычеты в них.

Развитая методика применена для исследования в кластерах кристалла SrTiO₃ полюсов функции Грина G_{11}^{Ti} , мнимая часть которой определяет ЛППС p-симметрии относительно центрального атома титана. Исследуемый кристалл имеет идеальную перовскитную структуру. Кластер минимального размера, в котором Ti p-ЛППС демонстрирует резонансное поведение, хотя и плохо выраженное, - это октаэдрический кластер TiO₆. Величина $-\text{Im}G_{11}^{Ti}$, рассчитанная для этого кластера для вещественного энергетического параметра функции Грина полным методом многократного рассеяния, показана на рис. 1. Здесь и в дальнейшем энергия отсчитывается от MT нуля. При расчетах использовался комплекс программ, разработанный в Ростовском госуниверситете ст. научн. сотр. А.А.Новиковичем. Можно предположить, что широкий двугорбый максимум в Ti p-ЛППС обусловлен существованием двух резонансов. Расчет величины $-\text{Im}G_{11}^{Ti}$, выполненный для различных отрицательных мнимых добавок (Γ) к энергетическому параметру функции Грина, действительно, показал существование двух

полюсов с мнимыми вычетами на нефизическом листе комплексной плоскости энергии. На рис. 2 показана модификация величины $-\text{Im}G_{11}^{Ti}$ с изменением указанной мнимой добавки (Γ).



Параметры низкоэнергетического полюса слабо меняются при учете f-рассеяния электронов атомом титана, в то время как параметры высокоэнергетического полюса изменяются сильно. Это позволяет считать, что первый полюс обусловлен резонансом р-волны в кластере TiO_6 , а второй – f-волны. Возможность наблюдения второго резонанса в р-ЛППС обусловлена смешиванием р- и f-состояний полей октаэдра. Расчет, проведенный для кластера $\text{TiO}_6\text{Ti}_6\text{O}_{30}$, содержащего помимо центрального TiO_6 октаэдра шесть соседних, показал, что число полюсов на нефизическом листе комплексной плоскости энергии резко возрастает по сравнению с малым кластером. Если, однако, ограничиться небольшой окрестностью полюса, обусловленного резонансом р-волны в TiO_6 октаэдре, в ней обнаруживается только два полюса, которые можно интерпретировать как результат формирования р-резонанса в увеличенном кластере из р-резонансов в центральном и соседних TiO_6 октаэдрах.

Список публикаций:

[1] И. Р.В. Ведринский, И.И. Гегузин Рентгеновские спектры поглощения твердых тел. М.: Энергоатомиздат, 1991

Исследование процессов переполяризации монокристаллов ТГС, облученных сильноточным импульсным пучком электронов

Макаров Виталий Владимирович

Иванова Татьяна Ивановна, Клевцова Екатерина Анатольевна, Маркова Татьяна Александровна, Самсонова Ольга Викторовна, Тютюнников Сергей Иванович, Ефимов Вадим Викторович

Тверской государственный университет

Иванов Владимир Васильевич, к.ф.-м.н

Vladimir.Ivanov@tversu.ru

Свойства сегнетоэлектриков, в частности триглицинсульфата (ТГС), в значительной степени определяются концентрацией и типом дефектов и примесей, содержащихся в кристалле [1]. Необходимо подчеркнуть, что исследование процессов переполяризации, диэлектрических свойств сегнетоэлектрических кристаллов, подвергнутых влиянию облучения сильноточным импульсным пучком электронов, представляет огромный интерес как в фундаментальном, так и прикладном плане. Авторами [2] были проведены спектроскопические исследования кристаллов ТГС, облученных импульсным пучком электронов. В работе [3] выполнены исследования влияния электронного облучения на диэлектрические свойства монокристаллов ТГС и ДТГС.

Для исследования процессов переполяризации в качестве наиболее чувствительного к процессам перестройки доменной структуры метода был выбран метод эффекта Баркгаузена [4].

Образцы монокристаллов ТГС представляли собой плоскопараллельные пластины полярного Y – среза, подвергнутые облучению вдоль полярной оси импульсными электронными потоками. Электроды для проведения измерений наносились на образцы методом напыления серебра в вакууме. Облучение проводилось на импульсном сильноточном источнике электронов и ионов (ИСИЭИ) в Лаборатории физики частиц Объединенного института ядерных исследований (ЛФЧ ОИЯИ), г. Дубна. Образцы облучались с обеих сторон. Кинетическая энергия электрона в импульсе составляла 250 кэВ, длительность импульса $\tau = 300$ нс, частота импульсов - 0,2 Гц. Флюенс электронов при облучении кристалла 1 импульсом соответствовал значению 10^{15} электрон·см⁻².

Выполнены исследования влияния облучения кристаллов ТГС сильноточным импульсным пучком электронов на интегральное число скачков Баркгаузена. Зависимости интегрального числа скачков Баркгаузена от напряженности электрического поля при облучении электронными потоками представлены на рис.1. Установлено, что интегральное число скачков Баркгаузена при переключении кристаллов ТГС методом ступеней увеличивается с ростом флюенса электронов от 0 до $60 \cdot 10^{15}$ электрон·см⁻². Это происходит потому, что с увеличением флюенса электронов в кристаллах ТГС увеличивается число дефектов, а вследствие этого и число скачков Баркгаузена. Подобная зависимость наблюдается во всем исследуемом интервале температур (см.рис.2).

Выполнены исследования температурной зависимости диэлектрической проницаемости при различных дозах электронного облучения. Диэлектрическая проницаемость измерялась мостовым методом на частоте 1 кГц. Установлено, что для кристаллов ТГС с ростом дозы облучения значение ϵ_{\max} уменьшается, а температура максимума диэлектрической проницаемости $T_{\epsilon \max}$ для кристаллов ТГС смещается в область более высоких температур.

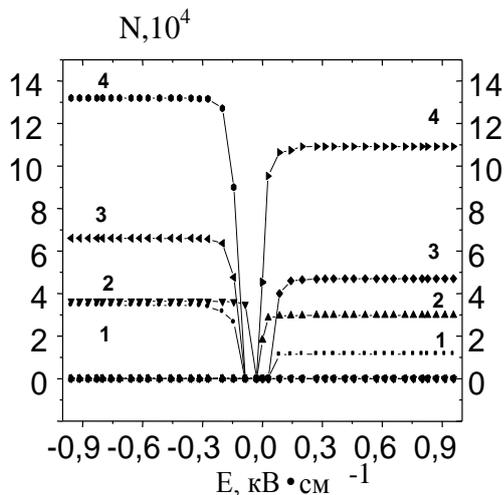


Рис.1. Интегральные кривые распределения числа скачков Баркгаузена по полю для сегнетоэлектрического кристалла ТГС при изменении его электрического состояния по кривой поляризации ступеньками :
1 – 0 к, 2 – 10к, 3 – 30к, 4 – 60к.

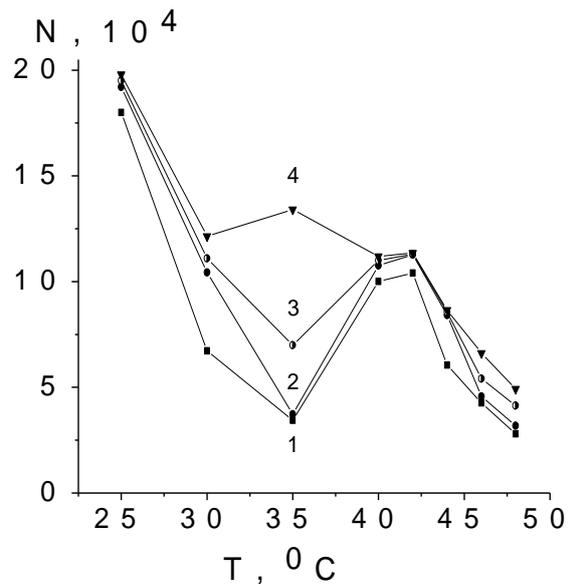


Рис.2. Зависимость интегрального числа скачков Баркгаузена от температуры. 1 – 0 к, 2 – 10к, 3 – 30к, 4 – 60к, ($k = 10^{15}$ электрон·см⁻²).

Данное явление (наблюдаемое для кристаллов ТГС) косвенно подтверждается проведенной ранее ИК спектроскопией. Было показано, что с увеличением дозы облучения (вплоть до 70к) происходит увеличение интегральной интенсивности полос, которая связана с плоским деформационным N-C-C колебанием в ионах глицина I, как показано в работах Галанова и Данильчука, обусловлено, по всей вероятности, увеличением жесткости сульфатных ионов, вследствие этого, происходит увеличение его деформирующего действия на ионы глицина и глициния. В итоге, увеличение жесткости сульфатных ионов приводит к более значительному упорядочению ионов глициния I и возникновению макроскопической спонтанной поляризации.

Работа выполнена при частичной поддержке программы “Университеты России”. №УР01.01.053.

Список публикаций:

- [1] Струков Б.А, Леванюк А.П. Физические основы сегнетоэлектрических явлений в кристаллах. -М.: Наука, 1995.-304 с.
- [2] Efimov V.V., Ivanov V.V., Klevtsova E.A., Novikova N.N., Sikolenko V.V., Tiutiunnikov S.I., Vinogradova E.A., Yakovlev V.A. // Optical constant of the TGS single crystal irradiated by power pulsed electron beam / Particles and nuclei, letters, 6[115] - 2002, с. 65-71.
- [3] Согр А.А., Копылова И.Б. // Униполярность диэлектрического гистерезиса в монокристаллах ТГС, индуцированная электронным облучением в РЭМ / Изв. РАН. Сер. физ.-1996, Т.60, 10, с.150-152.
- [4] Рудяк В.М. Процессы переключения в нелинейных кристаллах. -М.: Наука, 1986.- 248с.

Фотохимические реакции в кристаллах CdS_xSe_{1-x}

Маккаева Айша Асадулаевна

Хамидов Марасилав Магомедович

Дагестанский Государственный Университет

Хамидов Марасилав Магомедович, к.ф.-м.н

ami_ff@mail.ru

В кристаллах A_2B_6 , в частности CdS_xSe_{1-x} и его аналогах под воздействием света протекают фотохимические реакции (ФХР). Эти процессы, наряду с другими, приводят к деградации оптоэлектронных приборов. В связи с чем, выяснение природы и механизмов ФХР позволит решить практически важные задачи связанные с их долговечностью.

Исследованные кристаллы CdS_xSe_{1-x} до термообработки в атмосфере N или же в активирующей шихте были проводящими, что естественно связано с огромной концентрацией V_A и междоузельных доноров Cd_i . После отжига, кристаллы становились высокоомными, фоточувствительными и фотохимически активными.

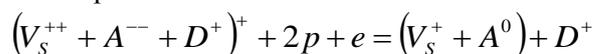
Нами, в термообработанных кристаллах, были исследованы изменения термостимулированной проводимости (ТСП) в результате ФХР.

В исходных дезактивированных кристаллах наблюдались две полосы ТСП при $T_{max} = 160K$ и $290K$. В результате протекания ФХР (охлаждение кристалла на свет от комнатных температур) интенсивность полосы $T_{max} = 160K$ возрастала более двух раз, а полосы $T_{max} = 290K$ более чем на два порядка. Энергетическая глубина соответствующих центров $E_c = 0.14эВ$ и $0.53эВ$ ответственных за эти полосы определены из наклонов начальных участков роста ТСП.

Изучению ФХР в кристаллах A_2B_6 посвящено много работ, однако до сих пор все еще нет ясного понимания их механизмов и природы позволяющих объяснить наблюдаемые изменения свойств кристаллов. В частности в работе [1] изменения спектров ТСП объяснены участием в ФХР комплексов типа $(V_A^- + D^+)^0$ и $(V_A^- + D_2^+)^+$. Эти центры по мнению авторов образуются в результате ФХР, а разрушаются в процессе термоопустошения V_A^- дефекта. Однако при температурах $T = 300K$ (область протекания ФХР) мала вероятность захвата третьего электрона анионной вакансией, а следовательно образованием за счет кулоновского притяжения димеров и тримеров с участием мелких доноров $D_{K.A}^+$, как предполагают в [1].

В отличии от [1] мы предполагаем, участие в образовании фотохимически активных комплексов акцепторов $A_{A,K}^{--}$ расположенных в анионных или катионных узлах. Это подтверждается и тем, что в исследованных кристаллах имеет место ИК-гашение фотопроводимости в широком температурном интервале вплоть до комнатных и выше, т.е. в области протекания ФХР.

Наблюдаемый рост интенсивности полос ТСП является по нашему предположению результат обратимой ФХР типа



В этих реакциях собственная подсветка увеличивает концентрацию неравновесных носителей в зонах, часть которых захватываются на соответствующие центры и тем самым

изменяют их зарядовое состояние. Действительно после захвата дырок акцептором междоузельный атом Cd_i^+ отходит от V_A^+ за счет кулоновского отталкивания с образованием центра $E_e = 0.14\text{эВ}$ ответственного за полосу ТСП $T_{\max} = 160\text{К}$. Второй продукт реакции $(V_S^+ + A_{K,A}^0)^+$, с неподвижными компонентами представляет собой центр $E_e = 0.53\text{эВ}$, ответственный за полосу ТСП $T_{\max} = 290\text{К}$. Не симметричный рост интенсивности обеих полос ТСП скорее всего результат слабой заселенности уровня Cd_i^+ , из-за незначительной ее глубины. Прогрев кристалла до температур $T > 300\text{К}$ возвращает указанный комплекс в исходное состояние $(V_S^{++} + A^{--} + D^+)^+$. В таком состоянии почти все входящие в комплекс компоненты, из-за сильного кулоновского взаимодействия и незначительности энергетической глубины некоторых из них почти не заполнены, т.е. не могут внести существенного вклада в интенсивность ТСП. Этот вклад подтверждается тем, что ТСП в фотохимически неактивированных кристаллах, как было отмечено выше, имеет очень слабую интенсивность.

Так, что предложенный механизм и природа ФХР не противоречит экспериментальным результатам.

Список публикаций:

[1] М.А. Ризаханов, Г.М. Гасанбеков, М.К. Шейнкман, *Фотохимические реакции и модели некоторых центров прилипания электронов в CdS и его аналогах. Физика и техника полупроводников, том 8, вып. 8, 1974г.*

Синтез и исследование структурных и электрических свойств сульфидов $Co_xMn_{1-x}S$

Мальцева Екатерина Александровна

Красноярский Государственный Университет

Рябинкина Людмила Ивановна, к.ф-м.н

Романова Оксана Борисовна, к.ф-м.н

rob@iph.krasn.ru

В настоящее время интенсивно исследуются сульфиды $Me_xMn_{1-x}S$ ($Me = Cr, Fe$), созданные на основе моносulfида марганца с ГЦК решеткой типа NaCl. Интерес к этим соединениям вызван обнаружением в них концентрационного перехода металл – диэлектрик (ПМД) и эффекта колоссального отрицательного магнитосопротивления (КМС). [1, 2] Эффект колоссального магнитосопротивления и переход металл – диэлектрик уже достаточно давно привлекают внимание исследователей. Практическая значимость этих эффектов и важность изучения их механизмов стимулируют поиск и исследование новых соединений с КМС и ПМД.

В данной работе синтезированы поликристаллические образцы сульфидов $Co_xMn_{1-x}S$ ($0 < x \leq 0.4$), исследованы их структурные и электрические свойства.

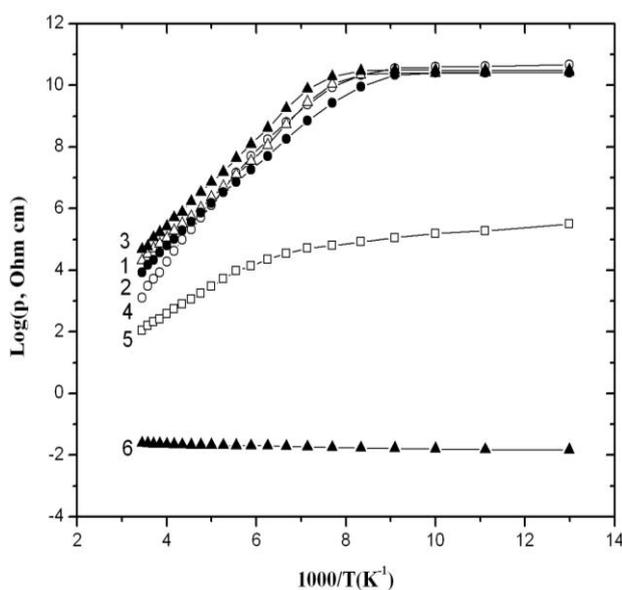


рис. 1

мелко дисперсного порошка для достижения гомогенности вещества. Для измерения электросопротивления из полученного порошка прессовались бруски в виде параллелепипедов, которые помещались в вакуумированные кварцевые ампулы и отжигались при 1000°C в течение двух часов.

Рентгеноструктурный анализ образцов проведен на дифрактометре ДРОН – 2.0 в монохроматическом CuK_α - излучении при 300 К. Согласно данным рентгеноструктурного анализа образцы $\text{Co}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ с $0 < X \leq 0.3$ имеют ГЦК решетку типа NaCl, характерную для α -MnS. С увеличением степени катионного замещения X параметр решетки линейно уменьшается от $\sim 5,222 \text{ \AA}$ ($X = 0$) до $\sim 5,204 \text{ \AA}$ ($X = 0.3$), что свидетельствует об образовании твердых растворов. На рентгенограмме образца $X = 0.4$ наблюдается дополнительная линия (102), относящаяся к гексагональной никель – арсенидной структуре CoS.

Измерения удельного электросопротивления были проведены четырехзондовым компенсационным методом на постоянном токе в интервале температур 77 – 300 К в нулевом магнитном поле (см. рис. 1) на образцах $X=0.05$ (1); 0.1 (2); 0.15 (3); 0.2 (4); 0.3 (5); 0.4 (6). Для твердых растворов $X \leq 0.3$ найден полупроводниковый тип проводимости с изменением удельного электросопротивления от $10^{10} \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ($X=0$) до $10^5 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ ($X=0.3$) при $T = 80\text{ К}$. Следует заметить, что характер температурной зависимости удельного электросопротивления для малых концентраций кобальта с $0.05 < X \leq 0.2$ аналогичен зависимости $\lg\rho(1/T)$ для нестехиометричных сульфидов марганца $\alpha - \text{Mn}_x\text{S}$ при изменении концентрации X. Возрастание концентрации кобальта в сульфидах от $X \sim 0.2$ до $X \sim 0.4$ приводит к существенному уменьшению удельного электросопротивления на ~ 12 порядков при 80 К. Для сульфидов $\text{Co}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ с $X = 0.4$ найден металлический тип проводимости с величиной удельного электросопротивления $\rho \sim 0,016 \text{ Ом}\cdot\text{см}$ при $T = 80 \text{ К}$.

Таким образом, в работе синтезированы новые сульфидные соединения $\text{Co}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$, в которых реализуется концентрационный переход металл-диэлектрик [3] и которые являются перспективными для изучения эффекта колоссального магнитосопротивления.

Список публикаций:

- [1] Петраковский Г.А., Рябинкина Л.И., Абрамова Г.М. и др. Письма в ЖЭТФ, **72**, 99 – 102 (2000)
- [2] Petrakovskii G.A., Ryabinkina L.I., Abramova G.M. et. Al. Phys. Met. Metallogr., **93**, 82 – 84 (2002)
- [3] Мотт Н.Ф. Переходы металл-изолятор. – М.: Наука, 1979. – 344 с.

Для получения образцов системы $\text{Co}_x\text{Mn}_{1-x}\text{S}$ был выбран метод вакуумированных кварцевых ампул. Исследуемые образцы были синтезированы из чистых (99.999%) элементов кобальта, марганца и серы, которые брались в соответствующих количествах, просушивались и помещались в кварцевые ампулы, которые вакуумировались и затем запаивались при помощи кислородной горелки. Ампулы с шихтой подвергались нагреву со скоростью 40°C в час до температуры 960°C . При этой температуре ампулы выдерживались в течение недели, затем охлаждались с печью.

В результате синтеза получались вещества в виде плотных слитков, которые растирались в агатовой ступке до

Исследование поверхности эмульсионных микрокристаллов AgBr методом декорирования.

Морозова Татьяна Владимировна

Черемисина Варвара Геннадьевна

Созинов Сергей Анатольевич

Кемеровский Государственный Университет

Колесников Лев Васильевич, д.ф.-м. наук, профессор

tania@kemsu.ru

Несмотря на то, что развиваются цифровые методы записи информации, галогенсеребряная фотография, благодаря ряду своих достоинств, хотя и сдает свои позиции на рынке, совсем с него не исчезает.

За длительный период истории развития фотографии, технологии получения и обработки фотографических материалов достигли своих наивысших пределов и благодаря этому обычная фотография, на сегодняшний день, во многих областях ее применения незаменима. Однако, качество фотографических материалов, хотя и достигло таких высот, но полного понимания физики процессов, происходящих на стадии записи и последующей обработки и сохранения информации, до сих пор нет. Одной из причин этого является недостаточность экспериментальных исследований с помощью современных методов исследования поверхности. Одним из таких методов является метод декорирования. Возможности этого метода в случае слоев AgBr продемонстрированы в [1]. В этой работе были получены трехмерные островки роста AgBr на чистой поверхности NaCl. После этого поверхность AgBr декорировали вакуумным осаждением золота. Оказалось, что хотя атомы золота достигают поверхность случайно, осажденное вещество формирует кластеры на определенных активных местах (в местах выхода на поверхность дислокаций). В [1], Панов, применяя технику декорирования, сравнил размер и количество кластеров, полученных осаждением равного количества серебра на несенсибилизированные и сенсибилизированные слои AgBr. Было показано, что частицы серебра более диспергированы на сенсибилизированной поверхности, в сравнении с несенсибилизированной. Известно, что сенсибилизация увеличивает количество мест поверхности, что приводит к увеличению количества, но уменьшению размеров образующихся кластеров. После сенсибилизации были применены два метода декорирования:

- 1.Общепринятое – вакуумное напыление различных металлов – Ag, Au, Bi;
2. Фотографическое – после экспозиции.

В обоих случаях при голодном проявлении наблюдалось образование ядер сферической формы, хорошо различимых в электронном микроскопе. Было показано, что в каждом случае сенсибилизации наблюдается своя специфическая картина в топографии образующихся частиц. Из результатов данной работы следует, что проявленные кластеры образуются в зависимости от типа сенсибилизации и практически не зависят от метода декорирования. Таким образом, декорирование выявляет активные центры на поверхности, созданные во время сенсибилизации, которые, вероятно, можно связать с центрами чувствительности.

До настоящего времени экспериментальные данные были получены для тонких слоев AgBr, выращенных на подложке NaCl и имеющих ориентацию(100). В данных экспериментах не учитывались размеры отдельных кристаллов. В реальных фотографических материалах используются микрокристаллы определенных размеров в зависимости от их назначения, так как известно, что размер микрокристалла влияет на их свойства. В связи с этим представляется интересным, применить данный метод для эмульсионных микрокристаллов AgBr. По нашему мнению, эксперименты такого рода могут внести вклад в понимание механизмов формирования центров чувствительности на поверхности микрокристаллов AgBr.

В представленной работе исследовалась поверхность эмульсионных микрокристаллов AgBr октаэдрического габитуса различных размеров. После напыления золота, наблюдалось осаждение и рост частиц преимущественно на некотором расстоянии от ребер микрокристаллов. Такая картина декорирования характерна не только для данного случая. Подобная топография образования частиц на поверхности наблюдалась при химическом созревании микрокристаллов, а также после интенсивной засветки микрокристаллов с последующим проявлением. В этих случаях образование серебряных центров наблюдалось также преимущественно на некотором расстоянии от края граней.

Результаты, проведенного эксперимента, а также экспериментальные данные других авторов, хорошо согласуются с представлениями поверхности октаэдрической (111) как более высоко – энергетичной и как следствие более высокой ее активности в сравнении с поверхностью кубической (100).

Таким образом, в работе было показано, что метод декорирования можно применять не только для исследования модельных систем, (таких как напыленные слои AgBr), но и для реальных микрокристаллов, использующихся в фотоэмульсии.

Список публикаций:

[1] Halfke H., Krohn M., Panov A. The surface structure of vapour-deposited films of AgBr and AgCl. *J. Cryst. Growth* 49. 1980.7.

Пространственная локализация дырок в страйпах на основе La_2CuO_4

Мыльникова Анастасия Сергеевна

Уральский Государственный Технический Университет

Коротин Михаил Аркадьевич, к.ф.-м.н

mas@optics.imp.uran.tu

Известно, что La_2CuO_4 , легированный Sr, обладает сверхпроводящими свойствами. При введении избыточных дырок в La_2CuO_4 образуется так называемая фаза страйпов. Она характеризуется наличием доменных стенок, которые находятся на границе нарушений идеального антиферромагнитного упорядочения спинов иона меди. Возможная конфигурация магнитных моментов меди в фазе страйпов, содержащей два избыточных положительных заряда на шестнадцать формульных единиц La_2CuO_4 , приведена на рис. 1. Возникает проблема изучения пространственного распределения избыточных дырочных состояний между атомами химических элементов, входящих в соединение.

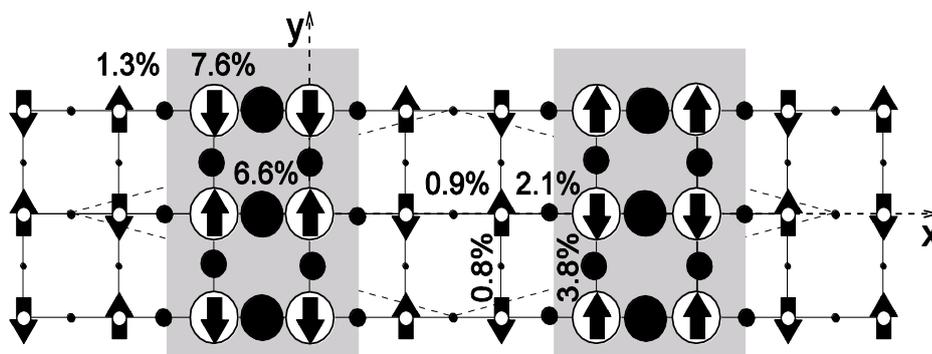


рис. 1

Указанная проблема решалась компьютерным моделированием электронной структуры страйповой фазы La_2CuO_4 , легированного избыточным положительным зарядом. Расчет был выполнен в приближении локальной электронной плотности с учетом параметра одноузельного

кулоновского взаимодействия U (LDA+ U) в базе линейризованных маффин-тин орбиталей (LMTO) с использованием приближения атомных сфер (ASA), с величинами кулоновского U и обменного J взаимодействия, равными 8 и 0.88 эВ, соответственно. На рис. 1 показаны: проекция элементарной ячейки на плоскость ab и магнитный порядок, задаваемый в расчете. Учет избыточных дырок происходил по модели жесткой полосы.

Результаты самосогласованного расчета электронной структуры исследуемого соединения показаны на рис. 2. Вычисление распределения дырочных состояний производилось по интегральной плотности состояний. Площадь под кривой плотности состояний, закрашенная в черный цвет, равна числу дырочных состояний, приходящихся на каждый из атомов в элементарной ячейке. Наглядная интерпретация полученных результатов представлена на рис.1, где радиусы окружностей пропорциональны процентному содержанию дырочных состояний на атомах элементов (соответствующие числа указаны рядом). Видно, что дырочные состояния сконцентрированы в основном на атомах меди Cu1, обеспечивающих металлическую проводимость, а также на атомах кислорода типа O1, расположенных между ними в плоскости ab . Эти страйпы (области кристалла с ферромагнитным порядком и преимущественной локализацией избыточного положительного заряда) выделены на рисунке серым цветом. Видно, что эти страйпы центрированы на атомах кислорода. Присутствие дырок практически не влияет на изоляторные свойства атомов меди типа Cu2, которые упорядочены антиферромагнитно, как в нелегированном La_2CuO_4 . На атомы кислорода типа O2, лежащие над и под атомами меди Cu1, приходится 1.2 % дырочных состояний, а на кислородах, относящихся к атомам меди Cu2, концентрируется 0.6 % избыточного положительного заряда. Меньше всего дырочных состояний приходится на атомы La – всего 0.3 %.

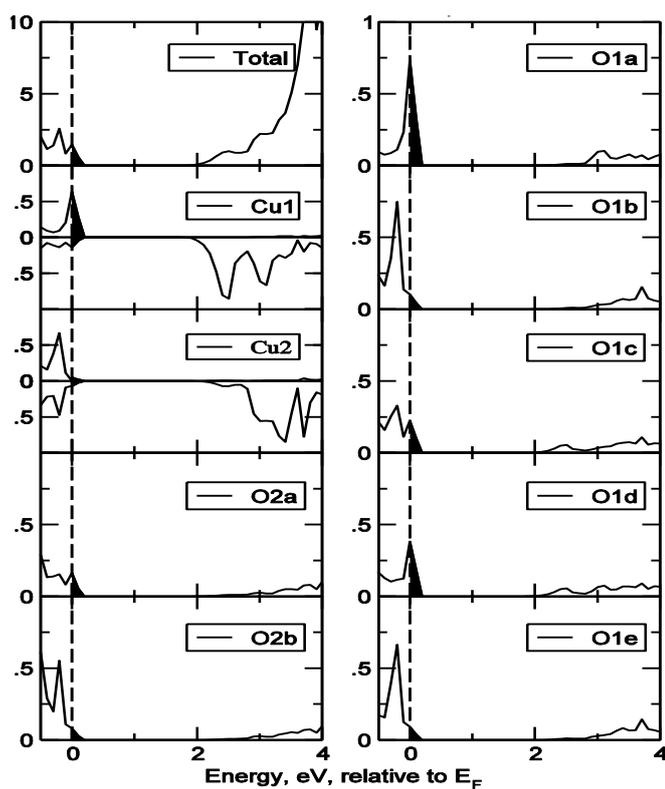


рис. 2

Представленные результаты исследования страйповой фазы демонстрируют, что распределение избыточного положительного заряда в элементарной ячейке неоднородно, дырочные состояния преимущественно сконцентрированы на атомах меди и кислорода в довольно протяженных в пространстве кристалла полосах металлической проводимости, центрированных на атомах кислорода.

Полученные результаты будут полезны при выборе параметров теоретических моделей, описывающих сверхпроводящее состояние купратов.

Более подробно с исследованием этой проблемы можно ознакомиться в препринте cond-mat/0402162.

Расщепление кристаллическим полем d-уровня иона Ti и его влияние на магнитные свойства соединений LaTiO₃ и YTiO₃

Мыльникова Анастасия Сергеевна

Пчелкина Злата Викторовна, Стрельцов Сергей Владимирович, Шориков Алексей Олегович

Уральский Государственный Технический Университет

Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н

mas@optics.imp.uran.ru

Пристальный интерес исследователей к сложным оксидам титана LaTiO₃ и YTiO₃ связан с неожиданным различием магнитных свойств данных соединений при их изоэлектронной структуре: YTiO₃ является ферромагнитным изолятором ($T_C = 29$ К, $\mu \approx 0.91 \mu_B$), а LaTiO₃ – антиферромагнитным изолятором G-типа ($T_N = 146$ К, $\mu \approx 0.56 \mu_B$) [1,2]. В работе [3] необычные свойства LaTiO₃ объясняются наличием в этом соединении орбитальной жидкости. Ее существование возможно, если энергия возбуждения электрона из основного в первое возбужденное состояние составляет порядка 0.1 эВ. Цель данной работы - оценить величину энергии возбуждения для исследуемых соединений, а также сравнить их магнитные свойства.

LaTiO₃ и YTiO₃ относятся к псевдокубическим перовскитам. Их структура получается из структуры идеального перовскита поворотом вокруг направления [001] с последующим наклоном кислородных октаэдров относительно направления [110]. Для любой пары соседних октаэдров наклон имеет разные знаки, тогда как поворот вокруг оси *c* происходит в одном направлении. Меньший радиус иона Y приводит к более сильному искажению в YTiO₃. Так полярный и азимутальный углы наклона и поворота CoO₆ октаэдров равны соответственно 19.2° и 13.3° для YTiO₃, и 11.3° и 8.1° для LaTiO₃. Пространственная группа симметрии - *Pbnm*. В отличие от LaTiO₃, в YTiO₃ искажение, выражающееся в удлинении одной из осей, является более существенным, чем искажение основания октаэдра [2]. Наличие длинной оси в кислородных октаэдрах (ось *z* локальной системы координат, в которой оси направлены на кислороды) снимает вырождение *t_{2g}*-уровня: происходит отщепление орбитали *xz*; в результате ниже по энергии оказываются линейные комбинации орбиталей *xz* и *yz*.

В настоящей работе был выполнен расчет электронной структуры соединений LaTiO₃, в YTiO₃ в приближении локальной электронной плотности (Local Density Approximation - LDA) методом линеаризованных маффин-тин орбиталей (Linearized Muffin-Tin Orbitals – LMTO) [4]. Параметры решетки и положения атомов были получены из работы [5]. Анализ характера расщепления был проведен на основе эффективного гамильтониана построенного на *t_{2g}* состояниях иона Ti в базисе функций Ванье [6]. Величина расщепления между заселенной и первой пустой орбиталью Δ_1 составила 0.18 эВ, 0.19 эВ, а величина расщепления между двумя незаселенными орбиталями Δ_2 - 0.08, 0.02 эВ для YTO и LaTiO₃ соответственно. Однако

полученная величина расщепления Δ_1 характеризует расположение уровней внутри $3d$ -оболочки иона Ti, а не энергию возбуждения электрона в кристалле.

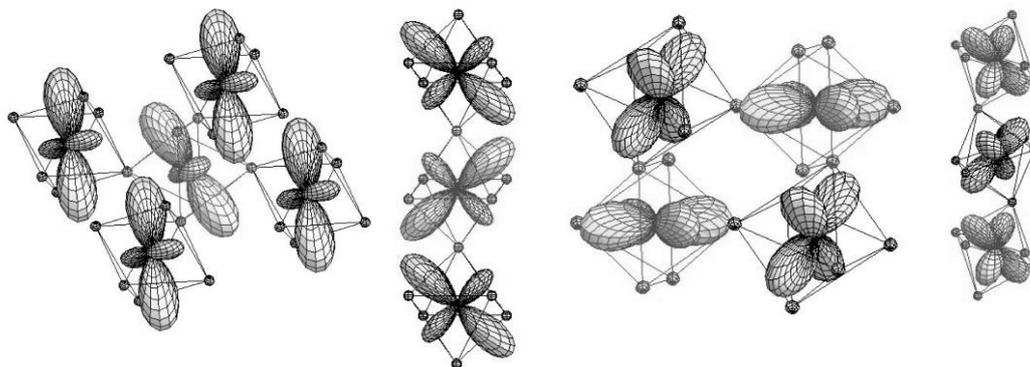


рис. 1

Наиболее прямой способ оценить энергию возбуждения из одного состояния в другое – найти разность полных энергий этих состояний. В этом случае происходит учет релаксационных процессов, приводящих к уменьшению оцениваемой величины в сравнении с Δ_1 . В данной работе был выполнен расчет в приближении LDA+U [7] для основного и первого возбужденного состояний. Величины параметров кулоновского U и обменного J взаимодействия были рассчитаны с помощью т.н. метода сверхъядерки[8]: $U=3.77$ эВ и $J=0.8$ эВ. Разница полных энергий между основным и первым возбужденным состояниями составила 140 мэВ и 150 мэВ для LaTiO_3 и YTiO_3 соответственно.

Используя матрицы заселенности d -оболочки иона Ti, полученные в LDA+U расчете, в настоящей работе построено угловое распределение электронной плотности на соседних иона Ti (см. рис.1, где слева направо представлены упорядочения LaTiO_3 в ab -плоскости и вдоль оси – c , упорядочения YTiO_3 в ab -плоскости и вдоль оси – c). Видно, что для YTiO_3 полученное упорядочение является антиферроорбитальным, приводя, согласно правилам Гуденафа-Канамори-Андерсона, к ферромагнетизму. В случае LaTiO_3 упорядочение в плоскости ab является ферроорбитальным, а вдоль оси c – антиферроорбитальным, что не согласуется с антиферромагнетизмом G-типа.

Полученные в настоящей работе величина расщепления d -уровня Ti и энергия возбуждения электрона из основного в первое возбужденное состояние имеют порядок 100 мэВ и не позволяют использовать орбитальную жидкость для объяснения различий в свойствах соединений LaTiO_3 и YTiO_3 .

Работа выполнена при поддержке Министерства образования РФ в рамках программы Университеты России, проект ур. 01.01.059.

Список публикаций:

- [1] C. Ulrich et al., *Phys. Rev. Lett.* **89**, 167202 (2002)
- [2] M. Cwik et al., *Phys. Rev. Lett.* **68**, 060401(R) (2003)
- [3] G. Khaliullin, S. Maekawa, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 3950 (2000)
- [4] O.K. Andersen, *Phys. Rev. B* **12**, 3060-3083 (1975)
- [5] D. A. MacLean, H. N. Ng, and J. E. Greedan, *J. Solid State Chem.* **30**, 35 (1979)
- [6] G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **52**, 192 (1937)
- [7] V. I. Anisimov, J. A. Zaanen, and O. K. Andersen, *Phys. Rev. B* **44**, 943 (1991)
- [8] J. Perdew, K. Burke and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1997)

Электронные корреляции. Компьютерное моделирование: стратегия, приближения, результаты.

Некрасов Игорь Александрович

*Келлер Георг, Кондаков Данила Евгеньевич, Кожевников Антон Викторович, Прушке Томас,
Хельд Карстон, Фольхард Дитер, Анисимов Владимир Ильич*

Институт физики металлов УрО РАН

Анисимов Владимир Ильич, д. ф.-м. н

nekrasov@optics.imp.uran.ru

Одним из наиболее важных направлений в физике твердого тела является изучение электронной структуры кристаллических материалов (например, оксидов переходных металлов и редкоземельных элементов), обладающих критическим поведением в некоторой области макроскопических параметров (например, мотовские изоляторы, различного рода магнетизм и т.д.). Эти необычные физические свойства данных материалов зачастую могут быть описаны гамильтонианом, содержащим только электронные степени свободы и обусловлены сильными кулоновскими электрон-электронными корреляциями.

В последние 15 лет активно развиваются методы компьютерного моделирования в физике твердого тела. Например, расчет электронной структуры кристаллических твердых тел или другими словами численное решение вышеупомянутого гамильтониана. Данные методы компьютерного моделирования должны быть, во-первых, самосогласованными, т.е. состоять из замкнутой системы уравнений. И, во-вторых, не должны содержать подгоночных параметров. Такие методы расчета называются расчетами из первых принципов.

В настоящее время нами активно используется и развивается созданная в нашей группе объединенная расчетная схема без подгоночных параметров LDA+DMFT (Local Density Approximation+Dynamical Mean Field Theory). Данная схема соединила в себе первопринципность теории функционала плотности в приближение локальной электронной плотности и мощь модельных подходов в описании корреляционных эффектов. Расчетная схема LDA+DMFT предназначена для моделирования электронной структуры сильно-коррелированных систем и микроскопического описания экспериментально наблюдаемых необычных свойств таких систем. В качестве наиболее полной работы по данной тематике Уважаемый читатель может обратиться к ссылке [1].

Список публикаций:

[1] K. Held, I. A. Nekrasov, G. Keller, V. Eyert, N. Blümer, A. K. McMahan, R. T. Scalettar, T. Pruschke, V. I. Anisimov, and D. Vollhardt, «The LDA+DMFT Approach to Materials with Strong Electronic Correlation», in *Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*, eds. J. Grotendorst, D. Marx and A. Muramatsu, NIC Series, Volume 10, 175 (Jülich, 2002), (http://psi-k.dl.ac.uk/newsletters/News_56/Highlight_56.pdf).

Исследование начальных стадий формирования оксида кремния

Некрасова Светлана Викторовна

Дальневосточный Государственный Университет

Саранин Александр Александрович, д.ф.-м.н

serzhpwr@mail.ru

При переходе к изготовлению микроэлектронных устройств нанометрических масштабов возникает необходимость дополнительных исследований тонких пленок окисных диэлектриков на поверхности кремния. На начальных стадиях исследований необходимо воспроизвести

контролируемый рост таких диэлектриков (в данном случае – оксида кремния) в условиях сверхвысокого вакуума с возможностью воспроизвести эти условия для других исследовательских установок.

Исследования начальных стадий роста оксида кремния на кремнии были сделаны методом Ожэ-электронной спектроскопии на сверхвысоковакуумной установке «Riber LAS-600». Были проверены условия формирования пленок SiO₂ в диапазоне толщин от 4 до 6 Å и от 25 до 30 Å при различных температурах подложки и давлениях кислорода. Отмечено, что при давлении кислорода в камере 10⁻⁷ торр и ниже и температурах 600 – 700⁰С не наблюдается формирование пленки оксида на поверхности кремния.

При давлениях 10⁻⁵ – 10⁻⁶ торр и температурах 700 -800⁰С наблюдается насыщение роста пленки оксида кремния.

Увеличение давления приводит к увеличению толщины пленки.

В результате подобраны оптимальные условия формирования пленок оксида кремния для толщин 6 и 30 Å.

На основе этих данных будут сделаны исследования тонких пленок оксида кремния с использованием сканирующей туннельной микроскопии.

Моделирование структуры карбина

Пасюкова Юлия Александровна

Мавринский Виктор Викторович

Челябинский Государственный Университет

Беленков Евгений Анатольевич, д.ф-м.н

belenkov@csu.ru

Карбин - третья, после графита и алмаза, аллотропная модификация углерода, синтезированная впервые в СССР в 1960 году [1]. В идеальном карбине атомы углерода должны находиться в состоянии sp гибридной, так что каждый атом образует ковалентные связи с двумя соседними. Однако синтезировать монокристаллы идеального карбина до сих пор не удается. В экспериментально синтезированных разновидностях карбина кроме sp гибридных атомов имеются атомы в состоянии sp² и sp³ гибридной, в результате такие материалы нельзя считать карбином в чистом виде [1, 2]. Относительно того, какова должна быть структура идеального карбина нет единого мнения [3], поэтому цель данной работы составило компьютерное моделирование трехмерной структуры идеального карбина.

В качестве модели для расчетов было принято, что кристаллы карбина состоят из карбиновых цепочек бесконечной длины расположенных параллельно друг другу. Цепочки карбина для расчетов брали двух основных структурных разновидностей – полииновые (чередование одинарных и тройных связей) и поликумуленовые (двойные связи).

Расчет трехмерной структуры карбина выполняли в два этапа. Сначала методом атом-атомного потенциала [4] исследовали парные взаимодействия карбиновых цепочек. Потенциал межатомных взаимодействий брали в виде:

$$U(r) = -Ar^{-6} + B \exp(-\alpha r), \quad (1)$$

где r – расстояние между атомами, а A , B и α – константы взятые из работы [4]. Вычислялись удельные энергии связей, приходящиеся на элементарные ячейки карбиновых цепочек. В результате этих расчетов были получены новые потенциалы взаимодействия для

расчета парных энергий связей цепочек в зависимости от расстояния и относительного сдвига в виде потенциала Ленарда-Джонса:

$$U(d) = -\frac{A(S)}{d^6} + \frac{B(S)}{d^{12}}, \quad (2)$$

d – межцепочечные расстояния, S – относительный сдвиг цепочек, коэффициенты $A(S)$ и $B(S)$ находили по формулам : $r_{мин} = \left(\frac{2B}{A}\right)^{1/6}$, а $E_{мин} = \frac{A^2}{4B}$, где $r_{мин}$, $E_{мин}$ – были найдены в результате расчета парных взаимодействий цепочек в зависимости S .

Второй этап расчетов заключался в нахождении трехмерной структуры жгутов карбиновых цепочек, для которой энергия связей минимальна. При расчетах варьировались расстояния между цепочками и их относительные сдвиги. Были рассмотрены кубическая и гексагональная структуры жгутов, кроме того, для гексагональной структуры была рассчитана структура с вакансиями [3] (см. рис.1).

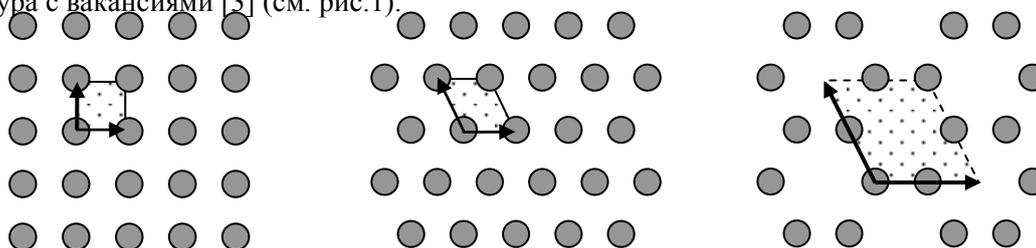


рис. 1.

В результате расчетов были найдены трехмерные структуры карбина, для которых энергия связей минимальна. Примеры структура жгутов с минимальными энергиями связей

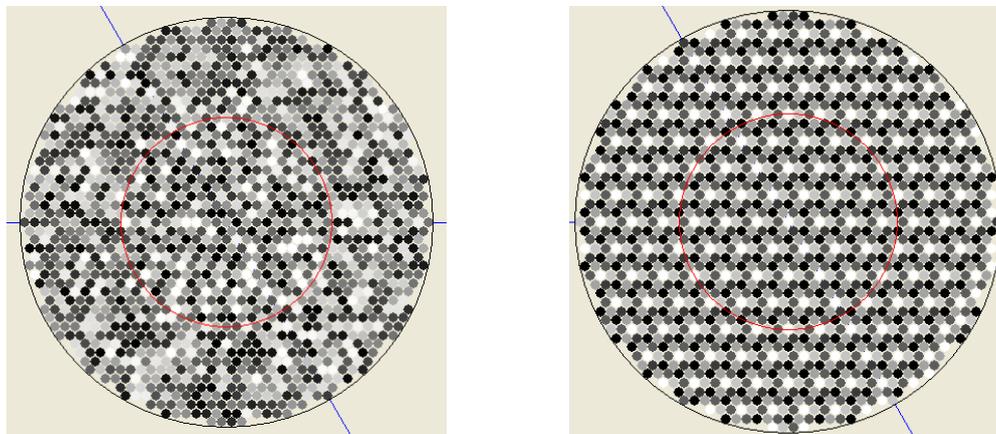


рис. 2.

приведены на рисунке 2 (градации серого цвета отражают относительный сдвиг карбиновых цепочек в диапазоне от нулевого сдвига – белый цвет, до сдвига равного вектору элементарной трансляции карбиновой цепочки – черный цвет). Установлено, что для квадратной структуры жгутов, гексагональной и гексагональной с вакансиями предпочтительнее являются периодические структуры - т.е. относительные сдвиги карбиновых цепочек таковы, что для этих структур существуют элементарные ячейки (параметры которых были определены), периодической трансляцией которых можно получить кристалл карбина. Хаотические структуры жгутов являются менее энергетически предпочтительными по сравнению с периодическими. Так как при этом удельные энергии связей атомов в жгутах с гексагональной структурой примерно на 20% меньше, чем для квадратной, и на 65% меньше чем для

гексагональной с вакансиями, то структура идеального карбина, по-видимому, это гексагональный жгут карбиновых цепочек с элементарной ячейкой, содержащей 9 цепочек.

Список публикаций:

[1] Kudryavtsev Yu.P. *Phys. and Chem. of Mater with Low-Dimensional Structures*, **21**, 1-4 (1998).

[2] Heimann B. H., Evsykov S.E., Kavan L, *Phys. and Chem. of Materials with Low-Dimensional Structures*, **21**, XIII-XV (1998).

[3] Булычев Б.М., Удод И.А., *Российский химический журнал*, **39**, 9-18 (1995).

[4] Китайгородский А.И. *Молекулярные кристаллы*, М: Наука, (1971), 424 с.

Изучение особенностей взаимодействия кристаллов LiH с атмосферой ядерно-физическими методами анализа

Патрушев Павел Павлович

Пилипенко Геннадий Иванович, Рябухин Олег Владимирович

Уральский государственный технический университет – УПИ

Рябухин Олег Владимирович, к.ф.-м.н

ppatrushev@mail.ru

Известно, что гидрид лития обладает высокой гигроскопичностью. При взаимодействии с атмосферой на поверхности гидрида лития образуются такие соединения, как LiOH, Li₂CO₃ и Li₂O. В работе [1] показано влияние образующихся соединений на различные свойства гидрида лития. В работе [2] с помощью электронной микроскопии и рентгенографического анализа исследованы динамика роста, химический состав, топография данных соединений. При этом время атмосферной экспозиции составляло от нескольких дней до 6 месяцев. Возможности резерфордовского обратного рассеяния (РОР) позволяют провести исследования на самых ранних стадиях образования соединений и выявить особенности взаимодействия LiH с атмосферой.

В данной работе методом РОР определялись поверхностная концентрация и глубина распределения кислорода в свежесколотом монокристалле LiH. Гидрид лития выращен методом Стокбаргера при избыточном давлении водорода до 10 атмосфер. Скол образцов проводился по плоскости спайности {100} непосредственно в исследовательской камере ускорителя при вакууме порядка 10⁻⁵ мм.рт.ст. Измерения спектров РОР проводились при облучении ионов He⁺ с энергией 3 МэВ, анализирующие ионы одновременно являлись и фактором радиационного воздействия. Энергетический спектр РОР ионов гелия, снимался на угле 90°, флюенсе 10¹⁵ см⁻².

Спектры РОР кристаллов гидрида лития, сколотого в вакууме, представлены на рис. 1. Непосредственно после скола на поверхности кристалла обнаружено наличие углерода и кислорода в количестве 1,4·10¹⁶ и 0,8·10¹⁶ ат/см² соответственно. В последующем, при контакте с атмосферой участок кристалла, который подвергался облучению, сорбировал значительно большее количество кислорода.

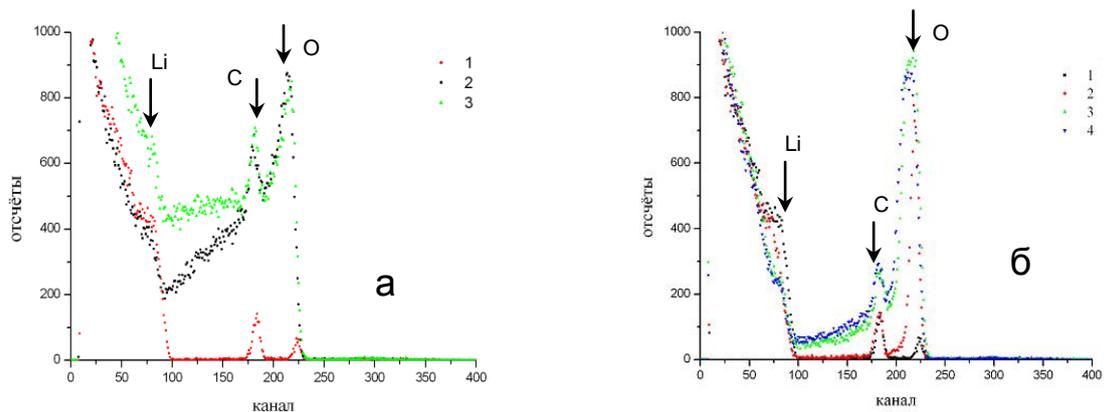


рис. 1. Спектры POP гидроксида лития в зависимости от времени контакта с атмосферой образца подвергнутого радиационному воздействию - (а) и чистого (б).

По спектрам POP была рассчитана концентрация кислорода сорбированного в приповерхностном слое и построена графическая зависимость (рис.2). Взаимодействие кислорода с облученной поверхностью оказывается сильнее, нежели в противоположном случае. В обоих случаях на этапе первичного взаимодействия концентрация кислорода увеличивается интенсивнее, чем в последствии.

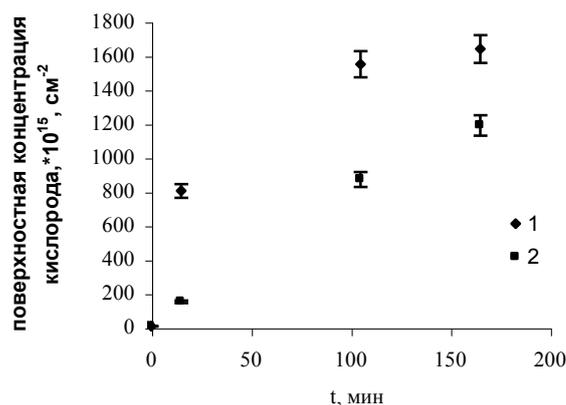


рис. 2. Зависимость поверхностной концентрации кислорода от времени контакта с атмосферой облученного – (1) и необлученного – (2) образцов LiH

В таблице (в предположении об образовании пленки LiOH в приповерхностном слое кристаллов) приведены расчетные значения поверхностной концентрации кислорода и толщины пленок LiOH в зависимости от времени контакта поверхности скола с атмосферой.

Т, мин	Поверхностная концентрация кислорода, $\times 10^{15} \text{ см}^{-2}$		Толщина пленки, Å	
	Облученная поверхность	Необлученная поверхность	Облученная поверхность	Необлученная поверхность
0	7.8	7.8	7,1	7,1
15	805	153	731	139
105	1550	872	1408	792
165	1640	1190	1490	1081
1305	2370	2280	2153	2071

Таким образом, диффузия кислорода в гидриде лития носит различный характер в зависимости от наличия радиационного воздействия, либо без него. Скорость диффузии выше в

случае взаимодействия атмосферы с облученной поверхностью. В случае взаимодействия с необлученной поверхностью концентрация кислорода увеличивается линейно и не достигает насыщения. Это говорит о том, что при облучении происходит разрушение поверхностной структуры кристалла и первоначально образовавшейся пленки LiOH и повышении активности облученной поверхности при взаимодействии с атмосферой.

Работа проведена при поддержке гранта Y1-P-05-17 Министерства образования Российской Федерации и Американского фонда гражданских исследований (CRDF).

Список публикаций:

- [1]. Луцик Ч.Б., Гаврилов Ф.Ф., Завт Г.С., Плеханов В.Г., Чолах С.О. *Электронные возбуждения и дефекты в кристаллах гидрида лития*. М.: Наука, 1985.
[2]. Holcombe G.E., Powell G.L. // *J. Nucl. Mater.*, 1973, vol. 47, №1, p. 121-124.

Изменения механических свойств и структуры металлического стекла на основе кобальта под воздействием термической обработки

Пермякова Инга Евгеньевна

Дудаков Станислав Петрович, Ушаков Иван Владимирович

Тамбовский Государственный Университет им. Г.Р. Державина

Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н

plushnik@mail.ru

Металлические стекла (МС) термодинамически нестабильны и при нагреве их структура и свойства меняются, релаксируя в состояние с меньшей энергией вплоть до полной кристаллизации. Особую важность с точки зрения применения приобретает вопрос об их термической стабильности и допустимых режимах эксплуатации. Изучение процессов структурной релаксации и кристаллизации, а также поведение физических свойств при этом дает возможность получить информацию о структуре и микроскопических механизмах перехода метастабильной системы в равновесное состояние.

Объект исследования – МС на основе кобальта состава: 75,4%Co+3,5%Fe+3,3%Cr+17,8%Si (вес.%). Перед механическими испытаниями образцы отжигали в печи при $T_{отж}$ =373–1183 К. Характер деформации и разрушения исследовали U – методом на изгиб, методом микроиндентирования на подложке с различной микротвердостью. Релаксацию напряжений измеряли с помощью разрывной машины струнного типа. Аморфность МС контролировалась проведением рентгеноструктурного анализа на дифрактометре ДРОН-2 и ДСК (Rigaku 8230).

Проведен анализ кривых напряжение – деформация (рис. 1). Применение испытаний на растяжение с целью установить поведение предела текучести МС от температуры отжига осложнено. Это связано с тем, что при достижении определенной температуры наступает сильное охрупчивание образцов, материал хрупко разрушается, не достигнув предела текучести.

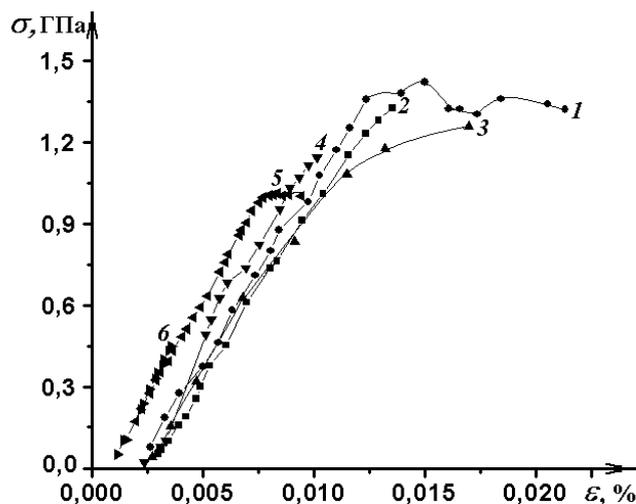


рис. 1 Кривых напряжение – деформация:
1 – без отжига, 2 – 373К, 3 – 453К, 4 – 543К, 5 – 613, 6 – 723К.

U – методом исследованы изменения пластичности МС от температуры отжига. Выявлено, что температура отпускной хрупкости МС коррелирует с продолжительностью термической обработки. Минимум пластичности соответствует переходу МС в кристаллическое состояние. Разработана методика определения пластичности отожженного МС, основанная на его индентировании на подложках. Установлен ряд преимуществ перед U – методом, главным из которых является возможность исследования пластичности в микробластях материала.

В соответствии со спецификой геометрии образцов и аморфного состояния выявлены особенности режимов измерения истинной микротвердости МС методом микроиндентирования по Виккерсу на подложках. Подобраны нагрузки, при которых материал подложки не влияет в пределах ошибки измерения на величину Hv и не наблюдается макроразрушений, искажающих картины отпечатков. Отмечено anomальное поведение величины микротвердости АМС от температуры предварительного отжига на стадиях перехода из аморфного состояния в кристаллическое при практически нулевой пластичности, исследованной U -методом.

В результате сравнительного анализа механических характеристик, полученных при микроиндентировании и U -методом, выявлено, что метод микроиндентирования позволяет более точно и адекватно фиксировать изменения механических свойств ленточных образцов МС.

Установлено, что процесс кристаллизации в лентах МС на основе кобальта обнаруживается вначале в тонком поверхностном слое. Наблюдается выделение разных по морфологии кристаллов (рис. 2). Первичными кристаллами являются дендриты ($T_{an} \approx 613$ К). Дендритной кристаллизации расценивается как еще одно свидетельство отсутствия первоначальной микрокристаллической структуры, поскольку при ее наличии можно было бы ожидать более гомогенный механизм роста кристаллов. При приближении температуры отжига к температуре кристаллизации МС ($T_{crys} \approx 853$ К) обнаружены кристаллы правильных форм в виде многогранников с плоскими гранями и прямыми ребрами.

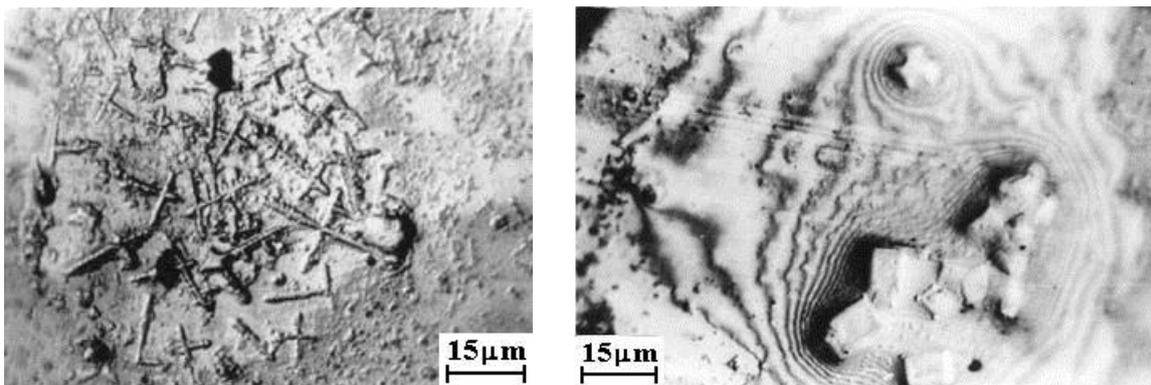


рис. 2 Морфология кристаллов на поверхности МС после термической обработки.

Причины раннего появления кристаллических областей обусловлены двумя факторами. Во-первых, увеличение субмикropористости (избыточного свободного объема) при отжиге, ведет к уменьшению упругой энергии. Во-вторых, происходит перераспределение химических элементов. Вблизи поверхности МС эти изменения протекают более интенсивно, чем в объеме.

По данным рентгеноструктурного анализа в целом, процесс кристаллизации исследуемого МС можно разделить на два этапа. На первом этапе фазовых превращений при переходе из аморфного в равновесное кристаллическое состояние происходит выделение фаз кобальта (ГЦК и ГПУ). На втором этапе – образованием комплексов фаз: металл-металлоид.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 01-01-00403).

Магнитомеханические свойства аморфного сплава $\text{Fe}_{79,3}\text{P}_{18,2}\text{V}_{2,5}$

Перов Андрей Викторович

Браун Владимир Владимирович

Воронежский Государственный Технический Университет

Калинин Юрий Егорович, д.ф-м. н

kalinin@ns1.vstu.ac.ru

В работе исследовано влияние фотонной и термической обработки на внутреннее трение (ВТ) и ΔE -эффект аморфного сплава $\text{Fe}_{79,3}\text{P}_{18,2}\text{V}_{2,5}$. Аморфные сплавы в виде фольги толщиной ~ 30 мкм были получены закалкой из жидкого состояния методом спиннингования. Образцы для измерения длиной 11 – 12 мм вырубали из аморфной ленты с помощью установки гильотинного типа. Измерения ВТ и ΔE -эффекта проводили методом резонанса-антирезонанса при комнатной температуре в диапазоне частот 100-200 кГц.

В исходном состоянии ΔE -эффект принимает значения $\Delta E/E \approx 3\div 7\%$ при напряженности магнитного поля насыщения $H_s \approx 70$ Э. Максимум внутреннего трения $Q^{-1} \approx 1,4 \cdot 10^{-2}$ наблюдается в поле 8 Э. Далее образцы подвергались термической и импульсной фотонной обработке (ИФО). ИФО сплава проводили в вакууме $5 \cdot 10^{-3}$ Па на установке УОЛП-1. Источником некогерентного излучения служили 3 газоразрядные ксеноновые лампы типа ИНП 16/250. Пленки подвергались обработке в течение 0,8 с при мощности излучения светового потока 10 Вт/см^2 , и отдельно трем последовательным обработкам при той же мощности излучения в магнитном поле, перпендикулярном длине образцов. При первой и второй обработке время воздействия составляло 1,2 секунды, при третьей – 1,1 секунды. После каждой обработки производили измерения магнитомеханических свойств образца. Исследования показали, что в процессе последовательной ИФО образцов, находящихся в магнитном поле, происходит увеличение модуля упругости, ΔE -эффекта и ВТ. Первая обработка приводит к

увеличению модуля упругости в поле насыщения относительно исходного состояния, увеличению значений ΔE -эффекта до 20 % и Q^{-1} до $5 \cdot 10^{-2}$. Последующие обработки ИФО приводят к небольшому уменьшению ΔE -эффекта и максимума ВТ относительно первой обработки. ИФО в течение 0,8 с в отсутствие магнитного поля приводит к незначительным изменениям магнитомеханических свойств.

Исследование влияния термической обработки в течение 15 мин при $T = 300$ °С показали, что значение модуля упругости увеличилось относительно исходного состояния, значение магнитного поля насыщения уменьшилось до 30 Э, максимум ВТ составил $Q^{-1} \approx 5 \cdot 10^{-2}$, ΔE -эффект $\Delta E/E \approx 20$ %.

Наблюдаемые изменения магнитомеханических свойств объясняются процессами структурной релаксации, ведущими к снижению внутренних механических напряжений. Релаксация внутренних напряжений протекает в большей степени при термическом отжиге по сравнению с обычной ИФО, не приводящей к кристаллизации. Внешнее магнитное поле, прикладываемое к образцу в процессе ИФО, формирует доменную структуру, чувствительную к внешним механическим напряжениям, а уменьшение внутренних механических напряжений способствует увеличению подвижности доменов, что приводит к увеличению магнитомеханических свойств.

Исследование проводимости тонких металлических плёнок

Петрунёв Сергей Николаевич

Сыктывкарский Государственный Университет

Котов Леонид Нафанаилович, д.ф-м.н

petrynev.ssu@mail.ru

В последнее время проявляется большой интерес к новому классу материалов - аморфным металлам, называемым также металлическими стеклами, которые представляют уникальную возможность для изучения разупорядоченных состояний среды.

Целью работы являлось изучение влияния проводимости от толщины тонких аморфных металлических пленок, полученных путем термического вакуумного осаждения паров металла на стеклянную подложку.

В данной работе исследовались рентгеноаморфные тонкие плёнки различных металлов, осаждённые методом термического распыления в вакууме на стеклянной подложке, толщиной 3 мм, к концам которой прикреплялись посеребренные контакты.

Чтобы исключить влияние окисла на значение проводимости, измерения проводились в той же самой вакуумной установке, где и происходило напыление. Для измерения проводимости плёнок была собрана автоматическая измерительная установка, включающая: источник питания Б5-43, частотомер ЧЗ-57, вольтметр В7-23, кварцевый калибратор (представляет собой тонкую пластину кварца, к обеим поверхностям которой подведены электрические контакты), находящийся в вакуумной установке на одном уровне с подложкой, а также компьютер, со специально написанной программой на С++, который был подключён к частотомеру и омметру через порты LPT1 и LPT2.

Кварцевый калибратор градуирован путем одновременного напыления меди с молибденовой лодочки на калибратор и на алюминиевую фольгу. Масса слоя меди, осажденного на алюминиевую фольгу, измерялась методом взвешивания на точных аналитических весах (точность Δ не хуже 0,05 мг), и определяли сдвиг частоты (разность частот до напыления и после). По градуировочной кривой находились поверхностные

плотности тонких пленок ρ_s . Предполагая незначительные расхождения между поверхностной и объемной плотностью, определялась толщина тонкой пленки.

Во время эксперимента измерения проводились каждые 250 мс. (одновременно мерялись частота и сопротивление). Зная размер образца и сопротивление тонкой плёнки, находилась проводимость.

На рис.1 приведён график зависимости проводимости тонких плёнок Au, Cu, и Fe от их толщины (данные по Fe были увеличены в 10 раз).

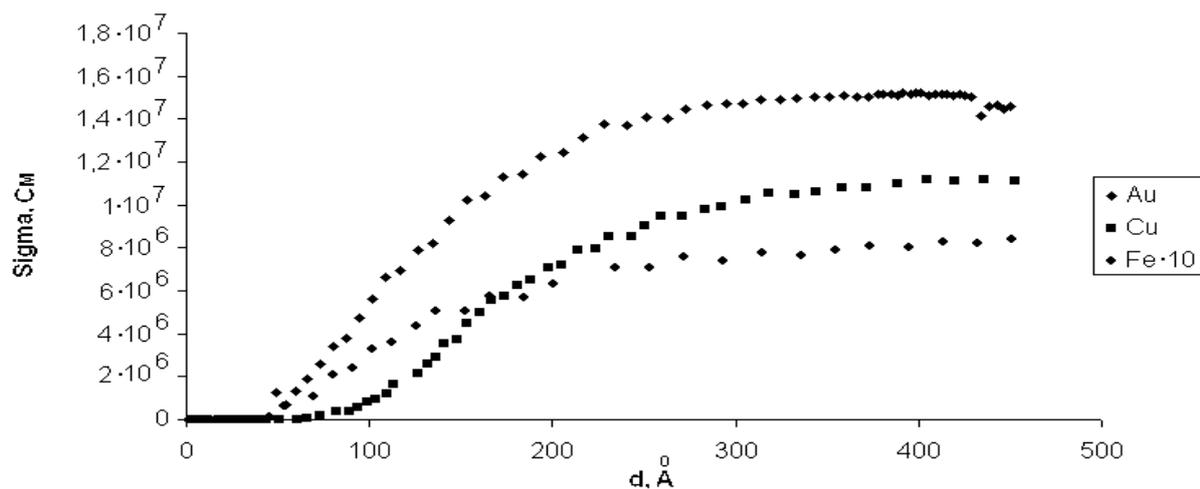


рис.1

После завершения процесса напыления тонких металлических плёнок на стеклянную подложку в вакуумную камеру закачивался воздух, и мерялось сопротивление плёнки во время её окисления.

На рис.2 приведён график изменения проводимости плёнок Au и Fe во время их окисления. Толщина плёнки Au была 840 Å, а плёнки Fe – 870 Å. На данном рис. не показаны данные по Cu, т.к. они были получены только для плёнок Cu с маленькой толщиной (60 Å).

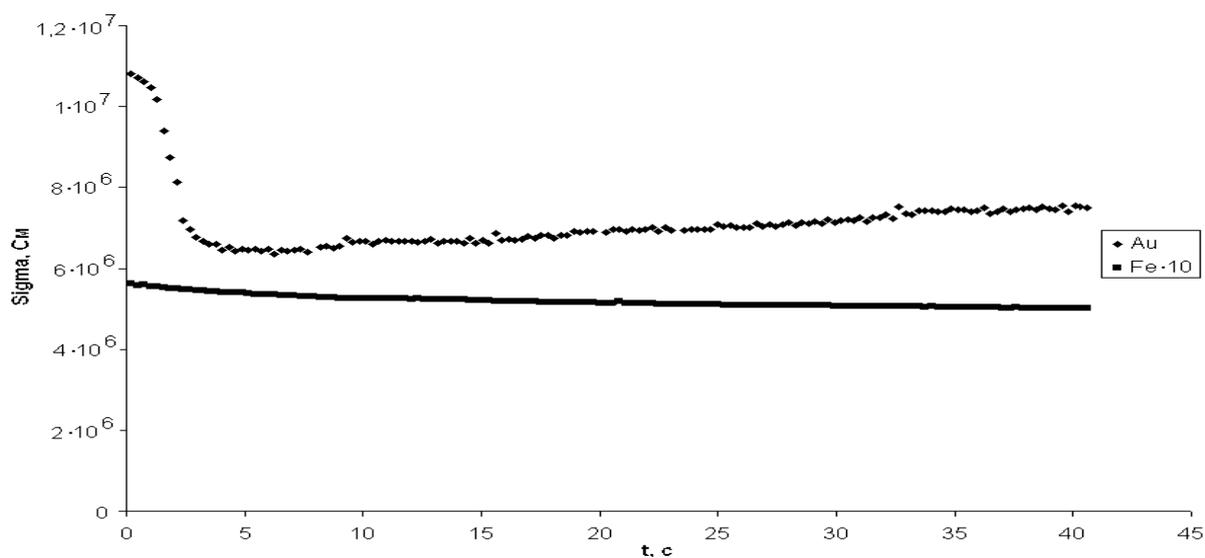


рис.2

Из рис.2 видно, что Au окисляется быстрее, чем Fe, причём у Au после резкого окисления плёнки постепенно начинает возрастать проводимость.

Таким образом, используя выше описанную методику эксперимента, можно получить более точные данные по проводимости, а также по окислению данных плёнок, кроме того, можно расширить исследования по тонким металлическим плёнкам.

Электрофизические свойства кристаллов ТГС, выращенных при температурах ниже 0°С

Плаксицкий Андрей Борисович

Рогазинская Ольга Владимировна, Юрьев Алексей Николаевич

Стеханова Жаннадмитриевна

Воронежский Государственный Университет

Миловидова Светлана Дмитриевна, к.ф.-м.н

pab13@mail.ru

Свойства кристаллов в значительной степени определяются условиями их получения. На свойства сегнетоэлектрического триглицинсульфата (ТГС) большое влияние оказывают различного рода примеси, всегда имеющиеся даже в номинально “чистом” кристалле. Концентрация дефектов в кристалле зависит от условий роста: выращивался ли кристалл при постоянной температуре методом выпаривания, или методом понижения температуры насыщения раствора. Обычно эти кристаллы выращивают из водных растворов, а их свойства в значительной степени определяются водородными связями. Точка Кюри для кристаллов, выращенных при $T > 20^{\circ}\text{C}$ находится при 49°C . Она характеризует прочность связей в кристалле и их способность к формированию доменной структуры, определяющей сегнетоэлектрические свойства. Однако состояние водородных связей в кристаллах ТГС можно изменять за счет условий их роста, например, изменяя температуру раствора. При этом особый интерес представляет зарождение и рост кристаллов при тех температурах (вблизи 0°C и ниже), при которых водородные связи в воде и водных растворах могут претерпевать существенные изменения. В литературе отмечается важная роль диапазона температур, при котором выращивается кристалл, температуры начала роста, в пара- или сегнетоэлектрической фазе и т.д. Однако сведения о выращивании водосодержащих кристаллов при температурах близких к 0°C отсутствуют.

Настоящая работа посвящена исследованию свойств кристаллов ТГС, выращенных при температурах ниже 0°C .

Для того, чтобы выращивать кристаллы из водных растворов при $T < 0^{\circ}\text{C}$ необходимо знать координаты точки эвтектики на Т-х проекции фазовой диаграммы соответствующей водной системы. Ранее, [1,2] были определены точки эвтектики для некоторых бинарных водных систем, в частности «глицин-вода» ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH} - \text{H}_2\text{O}$) и «триглицинсульфат- вода» ($(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH})_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4 - \text{H}_2\text{O}$), используя специально разработанный для этого способ фракционного плавления льда в соответствующих растворах [3]. Этот способ позволяет определить концентрацию эвтектики в бинарной водной системе по характеру распределения концентрации вещества, растворенного в воде по фракциям расплава для растворов разной исходной концентрации, а температуру эвтектики - по величине индукционного периода, определяющего время слитка льда от температуры его формирования до появления новых фракций расплава. Применение этого способа позволяет избежать тех трудностей, которые связаны с необходимостью устанавливать равновесие в водной системе при $T < 0^{\circ}\text{C}$. В то же время, применение его к водным системам, для которых положения точек эвтектики надежно определены классическими способами [4], показывает хорошее совпадение с известными

результатами. Его наиболее целесообразно применять для изучения водных систем со сложным ионно-молекулярным составом, к которым, например, относятся водные растворы аминокислот и их соединений. Проведенные исследования показали, что температура эвтектики в системе ТГС-Н₂О составляет -4°C , а концентрация ТГС - 11,75 масс. %.

В качестве исходных использовали растворы ТГС заэвтектической концентрации- 16 масс% при температуре 20°C .

Кристаллы были выращены из неконтролируемых точечных затравок методом понижения температуры насыщения раствора от -3°C до -5°C . Все кристаллы имели характерные для ТГС грани роста. Размеры по осям X,Y,Z не превышали соответственно значений 12,16 и 5 мм. Пироэлектрические исследования показали достаточно высокие значения пирокоэффициента как при комнатных температурах ($\gamma \sim 60$ CGSE), так и в максимуме ($\gamma \sim 600$ CGSE). Значения макроскопической поляризации P, рассчитанные по пироэлектрическим измерениям ($P \sim 1,7$ мкС/см²), ниже значений спонтанной поляризации ($P_S \sim 2,3$ мкС/см²), определенных по петлям диэлектрического гистерезиса в достаточно больших полях ~ 3 кВ/см. Значения коэрцитивных полей (~ 400 В/см) также свидетельствуют о жесткости доменной структуры исследуемых кристаллов. Точка Кюри кристаллов, выращенных при низких температурах, превышает T_C обычного ТГС на $0,2 \pm 0,3^{\circ}\text{C}$.

Полученные результаты могут быть связаны с изменениями структуры воды, происходящими вблизи 0°C . При этих температурах сетка водородных связей в воде и водных растворах становится более жесткой, число неразорванных водородных связей увеличивается, что приводит к закреплению доменов и как следствие, к увеличению T_C .

Список публикаций:

[1] Чудотворцев И.Г. Исследование фазовых диаграмм систем «вода-глицин», «вода-триглицинсульфат» методом фракционного плавления / И.Г. Чудотворцев, И.А. Попова, А.А. Федоренко, О.Б. Яценко // Труды VIII Региональной конференции «Проблемы химии и химической технологии» 21-22.09.2000 г. – Воронеж, 2000. – С.230-233.

[2] Growth of TGS crystals from aqueous solution at $T < 0^{\circ}\text{C}$ / O.B. Yatsenko, I.G. Chudotvortsev, I.A. Popova, Zh.D. Stekhanova, E.V. Savitskaya, D.L. Kotova, V.F. Selemenev // Forth International Conference Single Crystal Growth and Heat & Mass Transfer. Obninsk, 2001. V.1. – P. 183-188.

[3] Яценко О.Б. Особенности кристаллизации и плавления компонентов в водных растворах / О.Б. Яценко, Д.Л. Котова, А.А. Федоренко, И.Г. Чудотворцев // Конденсированные среды и межфазные границы, 1999. – Т.1, № 4. – С.328-333.

[4] Справочник химика. Т.3. - М.-Л.: "Химия", 1973. - 656 с.

Пироэлектрические свойства кристаллов ТГС с примесью ионов Европия

Плаксицкий Андрей Борисович

*Рогазинская Ольга Владимировна, Калгин Николай Игоревич
Воронежский Государственный Университет
Миловидова Светлана Дмитриевна, к.ф.-м.н
pab13@mail.ru*

В настоящей работе показано, что в зависимости эффективной диэлектрической проницаемости $\varepsilon_{\text{эф}}$ от напряженности внешнего электрического поля E для кристаллов ТГС с примесью европия в отличие от чистого кристалла ТГС, как и для всех исследованных ранее примесей (ионы Sr, молекулы L-α аланина), наблюдаются минимумы. Причем минимумы наблюдаются в полях, сравнимых со значениями внутренних смещающих полей, определенных по смещению петель диэлектрического гистерезиса. Очевидно до тех пор, пока внешнее

приложенное поле меньше внутреннего, оно не приводит к росту поляризации и $\epsilon_{эф}$ падает. Как только внешнее поле становится больше по величине внутреннего смещающего поля, начинается обычное, как и для чистого кристалла ТГС, увеличение $\epsilon_{эф}$ с ростом поля E. При приближении к температуре фазового перехода область минимальных значений $\epsilon_{эф}$ сужается и смещается в сторону меньших по величине полей, что находится в хорошем согласии с уменьшением внутренних смещающих полей при повышении температуры. Однако при этом уменьшение значения $\epsilon_{эф}$ в максимумах рассматриваемых зависимостей происходит в меньшей степени по сравнению с ТГС с хромом и приближается к аналогичным зависимостям для кристаллов ТГС с α -аланином.

Снятые по стандартной методике петли диэлектрического гистерезиса свидетельствуют о наличии в кристалле с примесью ионов европия внутреннего смещающего поля, которое при приближении к температуре фазового перехода уменьшается с 100 В/см до нуля с ростом температуры и величины напряженности измерительного поля.

О наличии смещающего поля свидетельствуют и формирование петель гистерезиса при увеличении величины напряженности измерительного поля.

Предварительные исследования эмиссионных спектров показывают большую величину эмиссионного тока во всем температурном интервале и в максимуме ток эмиссии электронов достигает 10^4 импульсов в секунду. Все это можно объяснить высокой степенью монодоменности исследуемых образцов.

Обобщая полученные результаты, можно предположить что, как и в кристаллах ТГС с L, α -аланином, в процессе выращивания кристаллов ТГС с ионами европия создаются большие упругие напряжения из-за большого ионного радиуса последнего. Это подтверждается и исследованиями доменной структуры. Кристаллы ТГС с ионами европия имеют высокую степень униполярности (на отдельных участках до 90 ÷ 100 %). Обычных для кристалла ТГС линзовидных доменов не наблюдается. Через поверхность скола всего кристалла проходят несколько необычных доменов с почти прямоугольными стенками.

Свойства оксида алюминия с сегнетоэлектрическими включениями

Плаксицкий Андрей Борисович

Рогазинская Ольга Владимировна, Сидоркин Вадим Александрович

Воронежский Государственный Университет

Миловидова Светлана Дмитриевна, к.ф-м.н

pab13@mail.ru

В настоящей работе исследуются диэлектрические свойства пористого оксида алюминия с включениями сегнетоэлектрического триглицинсульфата (ТГС). Природа формирования нанопористых оксидов на алюминии традиционно связывается с конкуренцией роста и растворения оксидной пленки в достаточно агрессивных электролитах (главным образом в сильных кислотах), однако в настоящее время, по мнению многих исследователей, принято считать, что определенную роль при формировании анодного оксида алюминия играют процессы самоорганизации, наблюдаемые в этом случае.

Оксидная пленка формировалась в водном растворе щавелевой кислоты и представляла собой плотно упакованные оксидные ячейки, имеющие форму гексагональных призм, спаянных между собой боковыми гранями («пчелиные соты»); диаметр ячеек порядка 70 ÷ 1000 Å, глубина ~ 3 мкм. Окисные ячейки перпендикулярны к поверхности металла и параллельны

друг другу. В центре каждой ячейки имеется одна пора, представляющая собой прямолинейный цилиндрический канал, диаметр которого мало зависит от электрических параметров оксидирования и определяется, главным образом, природой электролита. Основанием пористых оксидных ячеек является сплошной барьерный слой, непосредственно примыкающий к поверхности металла и имеющий толщину, одинаковую с толщиной стенок пор. Важным следствием такого рода строения пористых оксидных пленок на алюминии является их большая сорбционная способность.

Подготовленные пластины оксида алюминия опускались в насыщенный раствор соли ТГС при температуре 38,4 °С на 1 час. Визуально на поверхности была видна пленка ТГС. С части пластин эта пленка удалялась водой. На полученные образцы наносились электроды из сусального серебра. Температурные зависимости емкости и проводимости образцов исследовались с помощью моста переменного тока ВМ-484 на частоте 1,54 кГц и напряжении 0,3 В. Диэлектрическая нелинейность в сильных полях и петли гистерезиса изучались по стандартным методикам на частоте 50 Гц

Характерным в температурной зависимости емкости является наличие аномалии в области фазового перехода объемных кристаллов ТГС ($T_c = 49$ °С). Однако, наблюдаемый фазовый переход для пленки пористого оксида алюминия с включениями ТГС является сильно размытым, значения емкости изменяются от 30 до 300 пкФ (для некоторых образцов и до 40÷100 пкФ) при увеличении температуры от комнатной до области точки Кюри T_c . В то время как для объемных кристаллов ТГС емкость в указанном интервале температур увеличивается в сотни и тысячи раз. Необходимо отметить наличие двух максимумов в зависимости емкости от температуры для всех исследованных образцов независимо от того, насколько увеличивается емкость. Первый из них соответствует температурной области перестройки доменной структуры, которая подтверждается непосредственным наблюдением доменов, пироэлектрическими и другими исследованиями для объемных образцов. Второй, основной максимум, смещен относительно известной точки Кюри кристалла ТГС на 5÷6 градусов выше. Последнее свидетельствует о том, что образовавшиеся в порах оксида алюминия нанокристаллы ТГС, имеют внутреннее смещающее поле достаточно большой величины.

Зависимость трещиностойкости Si и Ge от скорости относительной деформации при динамическом микроиндентировании

Поверинова Галина Валентиновна

Тамбовский государственный университет Г.Р.Державина

Тюрин Александр Иванович, к. ф.-м. н

golovin@tsu.tmb.ru

Динамическое микроиндентирование, основанное на анализе кинетики (с высоким пространственным и временным разрешением) внедрения в материал жесткого индентора позволяет исследовать как пластические, так и прочностные свойства материала. Оценка прочностных свойств материалов при индентировании основана на использовании свойства хрупких материалов образовывать трещины в зоне сосредоточенного нагружения. Это позволяет получить количественные значения вязкости разрушения (критического коэффициента интенсивности напряжений 1-го рода - K_{Ic}) различных высокопрочных и малопластичных материалов в условиях действия высоких локальных напряжений.

Цель данной работы была в установлении зависимости коэффициента K_{Ic} от скорости относительной деформации и величины нагрузки приложенной к индентору.

Испытания были проведены с помощью экспериментальной установки по динамическому индентированию. Индентирование осуществляли пирамидой Берковича, в

качестве объекта исследования были выбраны Si и Ge. Исследуемый интервал относительной деформации $\dot{\epsilon}$ составлял от 10^{-2} до 10^2 c^{-1} .

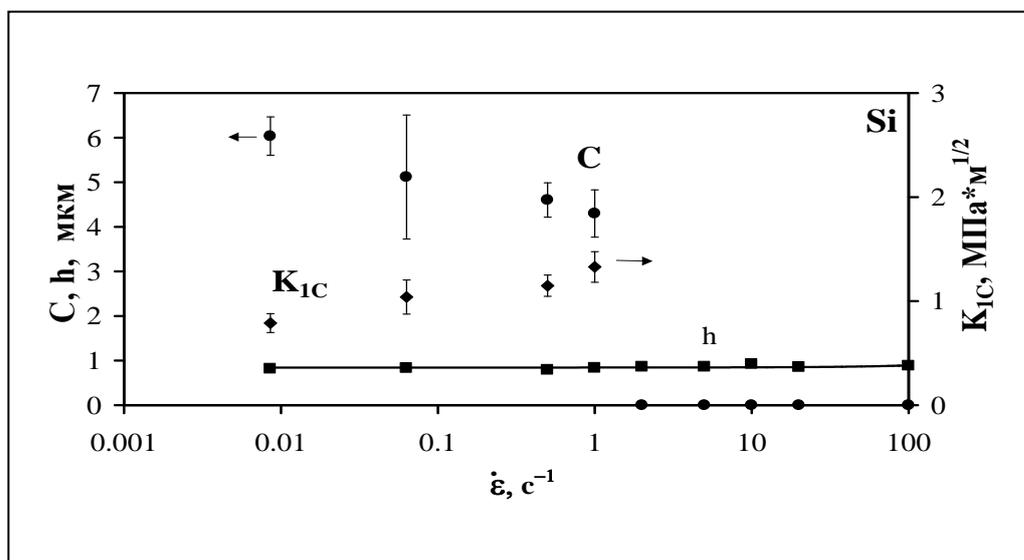


рис. 1. Зависимость коэффициента вязкости разрушения K_{Ic} и длины трещины – C от скорости относительной деформации $\dot{\epsilon}$, при постоянной глубине отпечатка h .

Показано, что например в Si при комнатной температуре и глубине 80 нм трещины зарождаются в интервале скоростей относительной деформации от 10^{-2} до 2 c^{-1} , а в интервале от 2 до 10^2 c^{-1} - трещины отсутствуют (см. рис.1). Определена зависимость размера трещины C и величины K_{Ic} от $\dot{\epsilon}$ при постоянной величине действующей силы $P=160 \text{ мН}$, а также в зависимости от P (в интервале от) при постоянном значении $\dot{\epsilon}=0.02 \text{ c}^{-1}$.

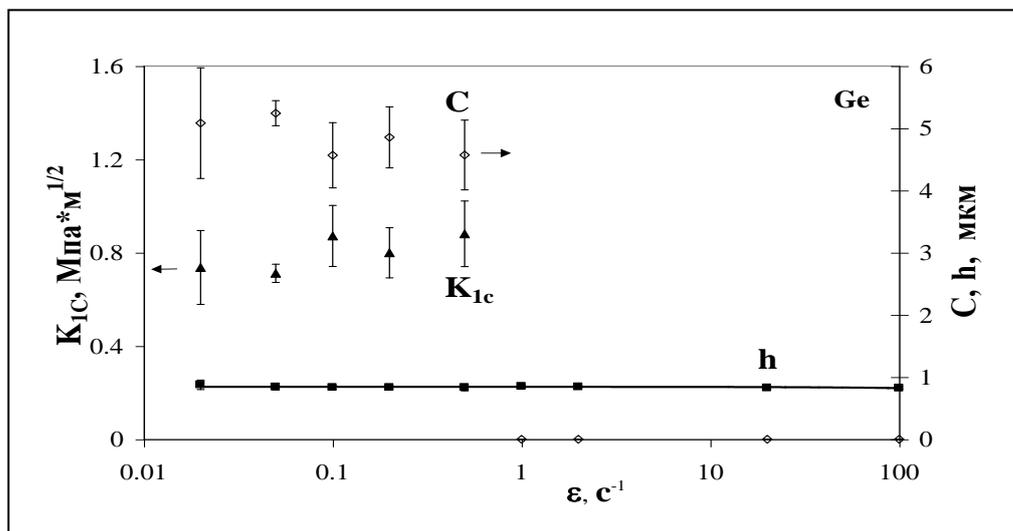


рис. 2. Зависимость коэффициента вязкости разрушения K_{Ic} и длины трещины – C от скорости относительной деформации $\dot{\epsilon}$, при постоянной глубине отпечатка h .

Такая же зависимость наблюдается в германии (см. рис. 2) при глубине отпечатка $h=840 \text{ мН}$ в диапазоне $\dot{\epsilon}$ от 0 до 0.5 c^{-1}

Таким образом в работе показано влияние скорости относительной деформации $\dot{\epsilon}$ (в диапазоне от 10^{-2} до 10^2 с $^{-1}$), величины действующей силы и глубины отпечатка на длину трещины S и величину коэффициента трещиностойкости K_{Ic} .

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 01-02-16573) и МО РФ грант в области естественных наук (шифр Е02-3.4-263).

Распределение зародышей меди по поверхности стеклоглуглерода при электроосаждении

Полянский Дмитрий Александрович

Аржанова Татьяна Александровна

Дальневосточный государственный университет

Крайнова Галина Сергеевна, к.ф.-м.н

rambo@ifit.phys.dvgu.ru

В данной работе проводится изучение распределения зародышей меди на поверхности стеклоглуглерода с помощью дифракционных и статистических методов. Рассматривается кинетика роста зародышей с целью определения управляющих параметров в процессе электроосаждения.

Осаждение проходило в следующих условиях: пластинка стеклоглуглерода СУ-10, механически отполированная до отсутствия видимых дефектов при 300-кратном увеличении отмывалась от поверхностных загрязнений и помещалась в качестве катода в электрилизер, заполненный водным раствором CuSO_4 и H_2SO_4 . Электроосаждение проводилось с использованием двухимпульсной методики. Сначала подавался основной катодный импульс η_1 (~150мВ) длительностью от 1 до 20 секунд, во время которого происходило формирование зародышей. Затем возникшие зародыши доращивали до видимых под микроскопом размеров при катодной поляризации η_2 ~30мВ.

Распределение зародышей не является стохастическим, наблюдается взаимная упорядоченность в радиусе 60 – 120 мкм, причём имеется набор характерных межзародышевых расстояний t_1, t_2, \dots, t_n , встречающихся гораздо чаще других и образующих геометрическую прогрессию $t_n = t_1 q^{n-1}$, $q \sim 1,45$, $t_1 \sim 2-5$ мкм, что соответствует размеру зоны «исключения зарождения», возникающей вокруг каждого доращиваемого зародыша из-за омического падения напряжения и диффузионного обеднения ионами меди. Наличие данного упорядочения объясняется тем, что возникшие во время действия η_1 зародыши имеют разный размер из-за неодновременности возникновения, а зародыш способен к дальнейшему самостоятельному росту при воздействии η_2 , если его радиус $r_1 \geq 2v_T \sigma / ze\eta$, где v_T – атомный объём фазы зародыша, σ – удельная поверхностная энергия границы зародыш/электродлит. Не успевшие достигнуть критического размера r_1 за время действия η_1 зародыши после снижения потенциала катода до η_2 «выключаются» из роста, превращаясь в «дозародышевые агрегаты» (ДЗА). Чем меньше отношение η_2/η_1 и короче длительность η_1 , тем больше зародышей остаётся на стадии ДЗА. В дальнейшем при действии η_2 ДЗА в зависимости от расположения относительно центров роста могут либо раствориться если находятся внутри диффузионной зоны, возникающей вокруг растущих зародышей, либо достигнуть радиуса r_1 и включиться в дальнейший рост, если находятся на границе диффузионной зоны.

В работе исследовались две серии образцов, параметризованных по времени действия τ_1 затравочного импульса η_1 (4, 23, 240, 480 секунд) и по плотности тока η_1 (3, 6.6, 10, 30 мА/см 2). Для идентификации распределения зародышей использовались два метода – получение и

анализ дифракционных картин Фраунгофера (ДКФ) и модель потоков пересечения границ сетки (ППГС).

Анализ ДКФ показал, что при увеличении времени действия затравочного импульса уменьшение межзародешевых расстояний идёт за счёт роста размеров зародышей, при $\tau_1=20$ секунд возникает анизотропия в распределении зародышей, которая при $\tau_1=240$ с. переходит в анизотропию формы. При $\tau_1=480$ с. зародыши приобретают кристаллографическую огранку. При увеличении плотности тока уменьшение межзародешевых расстояний идёт за счёт роста плотности зародышей, их размеры практически не меняются. При $I=30$ мА/см² в спектре появляются выделенные направления, что является следствием формирования поверхностной фазы, и анизотропия в данном случае характеризует возникающую систему пор.

Используемый в исследованиях программный комплекс позволяет получать угловые интегральные свёртки ДКФ. Оказалось, что спектральная плотность имеет ниспадающий характер, аналитика которого идентифицировалась в полулогарифмических и двойных логарифмических шкалах. В полулогарифмических шкалах для параметризованных по времени τ_1 образцов кривые спектральной плотности спрямились с хорошей достоверностью, следовательно, зависимость ИЧХ носит экспоненциальный характер, что соответствует стохастическому распределению зародышей. Для серии образцов, параметризованных по плотности тока, спрямления не наблюдается, что говорит о наличии некоторого упорядочения, возникающего при изменении плотности тока. В двойных логарифмических шкалах зависимость спектральной плотности для параметризованных по времени образцов допускает кусочно-линейную аппроксимацию, соответствующую составляющим спектра – коротковолновой (4.3 – 11 мкм) и длинноволновой (11 – 50 мкм). Размерности диапазонов $6.1 < \gamma_{кв} < 5.4$ и $0.69 < \gamma_{дв} < 0.49$, при изменении τ_1 размерности не меняются. Это означает, что время не является управляющим параметром, так как геометрия пространства, в котором идёт процесс формирования зародышей, не меняется.

Для параметризованных по плотности тока образцов зависимость спектральной плотности в двойных логарифмических шкалах допускает выделение трёх диапазонов – коротковолнового (**кв**) (4.5 – 8 мкм), средневолнового (**св**) (8 – 14 мкм) и длинноволнового (**дв**) (14 – 50 мкм). При изменении плотности тока **кв** и **дв** диапазоны ведут себя антифазно, на **св** присутствует явный максимум (при 10 мА/см²), соответствующий началу коалесценции, выделению ориентированных группировок зародышей и переходу от изотропного распределения зародышей, наблюдающегося при $I = 3 - 6.6$ мА/см² к возникновению агломераций и началу формирования поверхностной фазы, имеющему место при $I = 30$ мА/см².

Для исследования образцов методом ППГС выбран ортогональный растр. Для обеих серий функции распределения получились многомодальными, между расположением мод прослеживается связь в виде геометрической прогрессии $t_n = t_1 q^{n-1}$, $q \sim 1,45$. Выделенная средняя мода ведёт себя стохастически с изменением времени, это подтверждает, что время не является управляющим параметром при электроосаждении, при увеличении τ_1 растёт лишь размер зародышей, их количество и упорядочение не меняется. При изменении плотности тока средняя мода смещается в сторону меньших межзародешевых расстояний. Это говорит о том, что плотность тока является управляющим параметром, влияющим на плотность и распределение зародышей.

Особенности диффузии атомов переходных металлов в твердых растворах на основе никеля

Поярко Александр Александрович

Стерлитамакский государственный педагогический институт

Муллакаев Марат Салаватович, к.ф.-м.н

В настоящее время проводятся работы по созданию с помощью методов быстрой закалки сплавов на основе никеля, обладающих высокими механическими характеристиками при повышенных температурах. В связи с этим имеется потребность в исследовании механических свойств и термической стабильности таких сплавов в зависимости от природы легирующего компонента.

Из литературы известно, что при взаимодействии никеля с переходными металлами, стоящими в начале соответствующих рядов, имеет место перенос заряда, приводящий к увеличению электронной плотности в 3d зоне никеля [1]. В качестве легирующего элемента в никелевую матрицу вводится тантал, с одной стороны, имеющий достаточно широкую область растворимости в никеле, а с другой стороны, приводящий к значительному переносу заряда. Как диффундирующие элементы рассматриваются кобальт и ниобий. При выборе этих элементов принимались во внимание следующие соображения: при взаимодействии никеля и кобальта сколько-нибудь заметного переноса заряда не происходит, в то же время, в случае пары никель-ниобий, напротив, перенос заряда высок. Таким образом, в этих двух случаях существует возможность определить влияние легирования, приводящего к заметному перераспределению электронной плотности, на диффузию элементов, природа химической связи которых с атомами металла существенным образом отличается.

Измерения коэффициентов диффузии проводились в диапазоне температур 500-900°C. Для диффузии кобальта в чистый никель энергия активации составила 1,64 эВ, а предэкспоненциальный множитель $1,75 \cdot 10^{-15}$ см²/с. Легирование танталом приводило к уменьшению коэффициента диффузии во всем исследованном температурном диапазоне. При этом энергия активации процесса была 1,86 эВ, а предэкспоненциальный множитель составлял $8,9 \cdot 10^{-6}$ см²/с.

Некоторое увеличение энергии активации можно объяснить ростом энтальпии образования вакансий в твердом растворе. Кроме того, явление диффузионных процессов может происходить и вследствие того, что в отличие от связи кобальт-никель, связь кобальт-тантал, которая будет образовываться в процессе миграции атомов кобальта в твердом растворе, имеет значительную ионную составляющую. Для диффузии ниобия в никель были получены следующие данные: энергия активации диффузии равнялась 3,08 эВ, а предэкспоненциальный множитель 4,3 см²/с.

Характер наблюдаемых изменений параметров процесса диффузии при легировании никеля танталом заметным образом отличается от описанного выше. В этом случае наблюдалось увеличение коэффициента диффузии ниобия во всем температурном диапазоне при введении в сплав тантала. При этом энергия активации и предэкспоненциальный множитель составили соответственно 2,92 эВ и 1,6 см²/с. Такое поведение, по всей видимости, связано с тем, что перенос электронов с атомов ниобия в твердом растворе никель-тантал меньше, чем в чистом никеле.

Это предположение подтверждается данными спектроскопических исследований; отношение интенсивностей оже - переходов I(MVV)/I(MNN) в никеле составляет 1,52, а в твердом растворе никеля - 8 ат. % тантала эта величина равна 1,64.

Приведенные экспериментальные данные свидетельствуют, что легирование никеля танталом, приводящее к росту электронной плотности в 3d зоне никеля, различным образом

влияет на диффузию переходных металлов. В твердом растворе никель-тантал наблюдается замедление диффузии атомов кобальта, химическая связь которого с танталом имеет значительную ионную составляющую. В то же время уменьшение переноса заряда с атомов ниобия, находящихся в твердом растворе никель-тантал, приводило к росту скорости диффузии атомов ниобия по сравнению с диффузией этого элемента в чистый никель.

Список публикаций:

[1]. Миркин Л.И. Рентгеноструктурный анализ. Справочное руководство. – М. 1981.-496 с.

Изменение энтропии структур оксид кремния – кремний при радиационном облучении

Протопопов Григорий Александрович

Московский инженерно - физический институт

Попов Виктор Дмитриевич, д. т.н

Greg_aaa@mail.ru

Численно рассчитывается изменение энтропии при воздействии гамма-облучения на МОП структуру.

В настоящее время доминирующее положение в микроэлектронике заняли кремниевые интегральные микросхемы, изготовленные по планарной технологии, неотъемлемой частью которых является структура кремний – оксид кремния. В связи с тем, что пленка оксида кремния выращивается при высоких температурах ($T \geq 1000^\circ\text{C}$), а коэффициенты линейного расширения кремния и оксида кремния различаются примерно в 10 раз, при нормальной температуре структура кремний – оксид кремния оказывается напряженной (приповерхностная область кремния растянута, а пленка оксида – сжата). Нас интересует главным образом приповерхностная область (4-6 мкм). При облучении такой структуры ионизирующими излучениями (ИИ) наблюдается уменьшение механических напряжений вследствие подпорогового дефектообразования [1].

Целью настоящей работы является исследование изменения энтропии структуры кремний – оксид кремния при воздействии ИИ. Энтропия является мерой беспорядка системы, и по её изменению можно судить о структурных изменениях в приповерхностной области.

Механизм релаксации механических напряжений

В случае механических напряжений атомы вещества находятся не в абсолютном, а в локальном минимуме свободной энергии. Если на такую механически напряженную структуру действует ИИ, то происходит разрыв напряженных валентных связей.

Разрыв напряженных связей возможен как в результате образования вакансий, так и без перехода атома в междоузлие. Во втором случае разрыв напряженных связей имеет место без образования дефектов в обычном их понимании. Этот процесс называют подпороговым дефектообразованием, так как на образование дефекта затрачивается энергия ИИ, меньшая пороговой энергии смещения атома из узла в междоузлие. Нарушение равновесного состояния атомов при разрыве напряженной связи приводит к их перемещению в положение, соответствующее состоянию с меньшей свободной энергией. Таким образом образуется дефект, который предложено назвать псевдовакансией [1].

В структурах диэлектрик-полупроводник разрыв напряженных связей, связанный с процессом возникновения псевдовакансии, сопровождается увеличением плотности электроактивных центров (так называемых поверхностных состояний) на границе раздела двух материалов.

Анализ изменения энтропии

Изменение напряжений в структуре при разрыве n валентных связей можно описать выражением

$$\Delta\sigma_{\Sigma} = -(2/A_{эф}) \cdot (K \cdot c + 3F_0) \cdot n \quad (1)$$

где K – коэффициент упругости связи, c – расстояние, на которое сместился атом, F_0 – первоначальная сила, действующая на атом со стороны соседнего атома, $A_{эф}$ – эффективная площадь.

Если N – полное количество атомов (порядка числа Авогадро), а n – число разрывов (дефектов), то количество микросостояний, которыми может реализовываться данное макросостояние равно

$$\Omega = N \cdot (N - 1) \cdot \dots \cdot (N - n + 1) = (N)! / (N - n)! \quad (2)$$

Энтропия, приведённая к коэффициенту Больцмана k , с учетом того, что $n \ll N$ (N порядка 10^{23} см^{-3} , а n порядка 10^{19} см^{-3}) и с использованием (2), определяется выражением

$$f = S/k = \ln \Omega = n \cdot \ln N - n^2 / N \quad (3)$$

Решив (3) относительно n и подставив решение в (1), получаем связь между изменениями механических напряжений $\Delta\sigma_{\Sigma}$ и энтропии ΔS

$$\Delta\sigma_{\Sigma} = \frac{2(\xi \cdot c + 3F_0)}{A_{эф}} \cdot [(N/2) \cdot \ln N - (N/2) \cdot \ln N \cdot \sqrt{1 - 4\Delta S / (k \cdot N \cdot \ln^2 N)}], \quad (4)$$

где ξ – коэффициент упругости связи между соседними атомами. Используя данные [1] и выражение (4), получаем, что при облучении МОП-структуры дозой $D \sim 1$ Мрад $\Delta\sigma_{\Sigma} = 2,52 \text{ кГ/см}^2$ и изменение энтропии $\Delta S = 4,5 \cdot 10^{-8} \text{ Дж/К}$.

Подводя итоги, можно сделать вывод, что при облучении структуры оксид кремния – кремний, механические напряжения в структуре уменьшаются, и одновременно увеличивается энтропия системы за счет образования псевдовакансий. Также установлена корреляция между изменением механических напряжений и изменением энтропии и проведены численные расчеты.

Список публикаций:

[1] Тензоррадиационный эффект в полупроводниковых структурах / Л.Н.Линник, Л.Н.Патрикеев, В.Д.Попов, Н.М.Ройзин // Известия ВУЗов – Радиоэлектроника. 1982. Том XXV. №5. С.90-92.

Особенности физических свойств сегнетоэлектриков с магнитным упорядочением

Пряхина Марина Эдуардовна

Скрипченко Екатерина Анатольевна

Воронежский Государственный Технический Университет

Иванов Олег Николаевич, д.ф.-м.н

marka_pr@mail.ru

Неослабевающий интерес к исследованию материалов, которые одновременно обладали бы сегнетоэлектрическими (антисегнетоэлектрическими) и ферромагнитными (антиферромагнитными) свойствами, обусловлен, прежде всего, поиском и изучением предсказанного Смоленским и Иоффе взаимодействия между этими свойствами; очевидно, что обнаружение такого взаимодействия сможет значительно расширить области практического использования сегнетоэлектрических материалов [1].

Целью настоящей работы явилось исследование особенностей поведения диэлектрических, упругих и неупругих свойств керамических соединений на основе свинец-содержащих сегнетомагнетиков со структурой перовскита в области сегнетоэлектрического и антиферромагнитного фазовых переходов.

Исследованные образцы состава $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ и $\text{PbW}_{1/3}\text{Fe}_{2/3}\text{O}_3$ были приготовлены по двухстадийной керамической технологии. Эти соединения отличаются последовательностью сегнетоэлектрического и антиферромагнитного фазовых переходов: в соединении $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ при охлаждении от высоких температур вначале реализуется сегнетоэлектрический фазовый переход, и при дальнейшем охлаждении в сегнетоэлектрической фазе наступает и антиферромагнитное упорядочение. В соединении $\text{PbW}_{1/3}\text{Fe}_{2/3}\text{O}_3$ наблюдается обратная последовательность фазовых переходов - вначале развивается антиферромагнетизм, а затем – сегнетоэлектричество.

Диэлектрические свойства образцов (диэлектрическая проницаемость ε и диэлектрические потери $\text{tg } \delta$) были изучены с помощью автоматического моста Е7-12 на частоте 1 МГц. Упругие (модуль сдвига G) и неупругие (внутреннее трение Q^{-1}) свойства измеряли с помощью обратного крутильного маятника на частоте ~ 10 Гц и при амплитуде деформации $\sim 10^{-4}$. Все эксперименты были проведены в режиме нагревания со скоростью $\sim 0,5$ К/мин.

В качестве примера ниже кратко рассмотрены результаты исследования диэлектрических (см. рис. 1), упругих и неупругих свойств (см. рис.2) образца $\text{PbW}_{1/3}\text{Fe}_{2/3}\text{O}_3$ в области сегнетоэлектрического и антиферромагнитного фазовых переходов. В области сегнетоэлектрического фазового перехода наблюдается широкий максимум на температурной зависимости ε с максимальным значением при температуре Кюри $T_C = 230$ К. Необходимо отметить, что эта температура почти на 50 К выше, чем сообщаемая в литературе. Такое отличие может быть связано с различной степенью композиционного беспорядка в конкретных образцах, характерного для некоторых двойных перовскитах. В сегнетоэлектрической фазе диэлектрические потери показывают ярко выраженный максимум, который, по-видимому, является суперпозицией, по крайней мере, двух пиков.

Температурная зависимость модуля сдвига в окрестности температуры Кюри является типичной для несобственного сегнетоэластического фазового перехода [2], и соответствует упругому смягчению образца в сегнетоэластической фазе. На температурной зависимости Q^{-1} наблюдаются пики при ~ 200 К и ~ 240 К.

Анализ зависимости $\varepsilon(T)$ в рамках термодинамического описания фазовых переходов показал, что сегнетоэлектрический фазовый переход является размытым фазовым переходом; в

интервале от температуры $T^* = 300$ К до ~ 360 К зависимость $\varepsilon(T)$ описывается линейным законом Кюри-Вейсса, а в интервале от T_C до T^* - квадратичным законом Кюри-Вейсса. Сделаны оценки постоянных Кюри-Вейсса и степени размытия фазового перехода.

Результаты анализа поведения упругости в области несобственного сегнетоэластического фазового перехода, размытого в интервале температур $\Delta T = 300-145$ К, позволили установить, что структурный фазовый переход (собственный сегнетоэлектрический и одновременно несобственный сегнетоэластический фазовый переход) в соединении $\text{PbW}_{1/3}\text{Fe}_{2/3}\text{O}_3$ происходит в три стадии.

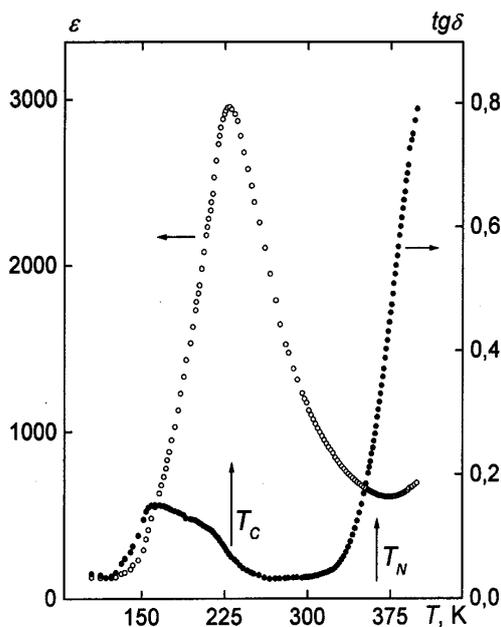


рис. 1

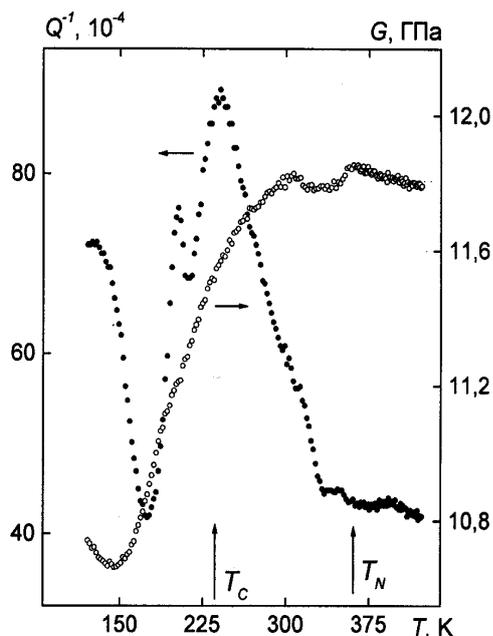


рис. 2

Аномалии упругих и неупругих свойств, обнаруженные в окрестности температуры Нееля, могут быть обусловлены магнестрикционной связью между деформацией и параметром магнитного упорядочения.

В работе проведен сравнительный анализ диэлектрических, упругих и неупругих свойств керамических образцов $\text{PbFe}_{1/2}\text{Nb}_{1/2}\text{O}_3$ и $\text{PbW}_{1/3}\text{Fe}_{2/3}\text{O}_3$.

Список публикаций:

- [1] Лайнс М., Гласс А. Сегнетоэлектрики и родственные им материалы. М.: Мир, 736 с. (1981).
- [2] Иванов О.Н. Кристаллография. 42, 4, 741 (1997).

Вычисление параметров неэмпирического модельного гамильтониана для La_2CuO_4 в базисе функций Ваннье.

Пчёлкина Злата Викторовна

Леонов Иван Васильевич, Кондаков Данила Евгеньевич и Анисимов Владимир Ильич

Институт физики металлов УрО РАН

Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н

pzv@optics.imp.uran.ru

Высоко температурные сверхпроводники принадлежат к классу веществ, для которых учет сильных электронных корреляций очень важен для понимания физики явлений, которыми богаты эти соединения. Эти системы обладают нетривиальными фазовыми диаграммами, что затрудняет описание ВТСП в рамках неэмпирических расчетов (без подгоночных параметров), особенно в области малого легирования. В настоящее время наиболее часто используемым методом исследования ВТСП является модельный подход. Он содержит свободные параметры, которые получают подгонкой к экспериментальным данным (сравнение рассчитанной и экспериментальной поверхностей Ферми, законов дисперсии, и т. д.). Но эти параметры также могут быть получены напрямую в рамках неэмпирических расчетов. Сравнение параметров многозонной p-d модели и параметров, рассчитанных ab initio, для La_2CuO_4 приведено в работе [1].

В данной работе использовался другой метод вычисления параметров модельного гамильтониана. Часто при модельном подходе к рассмотрению принимаются не все зоны, а лишь частично заполненные. Для получения малого гамильтониана, соответствующего этим зонам, можно представить все гильбертово пространство собственных векторов матрицы большого гамильтониана в виде прямой суммы подпространства, соответствующего блоховским состояниям частично заполненных зон, и ортогонального к нему подпространства блоховских функций всех остальных зон. При этом матрица гамильтониана в базисе функций Ваннье будет блочно диагональной. И блок, соответствующий частично заполненным зонам, можно рассматривать как проекцию полного гамильтониана на подпространство, определяемое функциями Ваннье.

Локализованные функции Ваннье в ячейке с радиус-вектором \vec{T} для зоны с номером i впервые были предложены в работе [2]:

$$W_i(\vec{r} + \vec{T}) = \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\vec{T}} \cdot \psi_{i\vec{k}}(\vec{r}), \quad (1)$$

здесь $\psi_{i\vec{k}}(\vec{r})$ - функция Блоха. При этом выбор функций Ваннье неоднозначен, поскольку унитарное преобразование функций Блоха

$$\psi_{i\vec{k}} \rightarrow \sum_j U_{ji}^{\vec{k}} \cdot \psi_{i\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2)$$

дает равноценную функцию Ваннье. В работе [3] для получения максимально локализованных функций Ваннье первоначальное значение матрицы $U_{ji}^{\vec{k}}$ задается проектированием на некоторую пробную функцию $\varphi_n(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle$:

$$U_{ji}^{\vec{k}} = \langle \psi_{i\vec{k}} | \varphi_n \rangle. \quad (3)$$

В настоящей работе в качестве пробных функций выступает блоховская сумма ЛМТО орбиталей [5]:

$$\psi_{i\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{T}} e^{i\vec{k}\vec{T}} \sum_j c_{ji}(\vec{k}) \cdot \varphi_j(\vec{r} - \vec{T}) = \sum_j c_{ji}(\vec{k}) \cdot \varphi_j^{\vec{k}}(\vec{r}), \text{ тогда} \quad (4)$$

$$U_{in}^{\vec{k}} = \sum_{n'} \langle \psi_{i\vec{k}} | O_{nn'}^{-1/2}(\vec{k}) | \varphi_n^{\vec{k}} \rangle, \quad O_{nn'}(\vec{k}) = \langle \tilde{W}_{n\vec{k}} | \tilde{W}_{n'\vec{k}} \rangle. \quad (5)$$

И ортогонализированные функции Ваннье записываются в виде:

$$W_n(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{i=N_1}^{N_2} \psi_{i\vec{k}}(\vec{r}) \cdot \bar{c}_{ni}^*(\vec{k}) = \sum_{j,i=N_1}^{N_2} \bar{c}_{ji}(\vec{k}) \cdot \bar{c}_{ni}^*(\vec{k}) \cdot \varphi_j^{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (6)$$

Тогда матричные элементы малого гамильтониана в базе ортогонализированных функций Ваннье выглядят следующим образом:

$$H_{nm}^{\vec{k}} = \sum_i \langle W_{n\vec{k}} | \psi_{i\vec{k}} \rangle \varepsilon_i(\vec{k}) \langle \psi_{i\vec{k}} | W_{m\vec{k}} \rangle = \sum_i \bar{c}_{ni}(\vec{k}) \cdot \bar{c}_{mi}^*(\vec{k}) \cdot \varepsilon_i(\vec{k}), \quad (7)$$

а в реальном пространстве:

$$H_{nm}(\vec{T}) = \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{T}} \cdot H_{nm}^{\vec{k}}. \quad (8)$$

Используя формализм функций Ваннье, изложенный выше, мы получили параметры эффективного гамильтониана в реальном пространстве $H_{nm}(\vec{T})$ для La_2CuO_4 . Данная процедура была выполнена для следующего набора орбиталей, на которые производилось проектирование: $Cu d_{x^2-y^2}$; $Cu d_{x^2-y^2}$ и $d_{3z^2-r^2}$; $Cu d_{x^2-y^2}$ и $O_p p_x, p_y$; $Cu d_{x^2-y^2}$, $d_{3z^2-r^2}$ и $O_p p_x, p_y$, $O_a p_z$ (здесь O_p -атомы кислорода, лежащие в плоскости; O_a -вершинные атомы кислорода). Таким образом, мы получили интегралы перескока как эффективные t_{d-d} , так и через кислород t_{p-d} в четырех координационных сферах. Полученные параметры согласуются с результатами предшествующих работ. Однако в настоящей работе были получены параметры гамильтониана, включающего и одну $x^2 - y^2$ зону, и две зоны $x^2 - y^2$, $3z^2 - r^2$, а также учтены p состояния кислорода.

В дальнейшем при поддержке междисциплинарного гранта УрО РАН и СО РАН планируется совместно с коллегами из г. Красноярска использовать полученные наборы параметров для решения эффективной синглет-триплетной t-J модели для La_2CuO_4 .

Список публикаций:

- [1]. Кориунов М.М., Гавричков В.А., Коротин М.А., Некрасов И.А., Пчелкина З.В., Анисимов В.И., Овчинников С.Г., Тезисы докладов XXXIII совещания по физике низких температур, Секция S Сверхпроводимость, 215 (2003).
- [2] G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **52**, 192 (1937).
- [3] Marzari N. and Vanderbilt D., *Physical Review B*, **56**, 12847 (1997).
- [4]. Ku W., Rosner H., Pickett W. E., and Scalettar R. T., *Physical Review Letters*, **89**, 167204 (2002).
- [5] O.K. Andersen, *Phys. Rev. B* **12**, 3060-3083 (1975)

Стимулирование модификации ИК–спектров карбиноидов естественным светом в процессе старения

Сёмочкин Павел Сергеевич

Евсюков Сергей Евгеньевич

Челябинский Государственный Педагогический Университет

Песин Леонид Абрамович

spavel1983@rambler.ru

Исследуемые образцы были получены химической карбонизацией поливинилиденфторида (ПВДФ). Исходные пленки обрабатывались в течение различных промежутков времени от 1 до 720 мин по стандартной методике. С увеличением времени дегидрогалогенирования исследуемые образцы закономерным образом изменяли свой цвет. Измерения ИК–поглощения проводились с помощью спектрометра Specord 75 IR. Особенностью спектров всех исследуемых образцов является интерференция, характер которой зависит от времени дегидрогалогенирования.

Форма спектров свежизготовленных образцов существенно зависит от продолжительности реакции. Наиболее значительные изменения по сравнению с ПВДФ происходят в интервалах волновых чисел 1500–1900 и 2200–3700 см^{-1} . Эффект, проявляющийся в первом из них, связан с увеличением концентрации двойных углерод–углеродных связей. Форму спектров во втором интервале определяет наличие ОН– и СН–групп, а также влияние водородных связей (2200–3700 см^{-1}). В течение 6 месяцев после синтеза карбиноидные пленки хранились в темноте. После этого были получены их контрольные ИК–спектры. Затем каждый из образцов разрезался на две части. Одна из них хранилась в течение следующих 12 месяцев в темноте, извлекаясь лишь два раза (через полгода и через год) для 30–минутной съемки. Другая в дневное время находилась под воздействием солнечного света, ослабленного обычным оконным стеклом, интенсивность которого менялась в соответствии с погодными условиями и временем суток и года. На рис. 1 и 2 в качестве типичного примера представлены ИК–спектры двух образцов с продолжительностью синтеза, соответственно, 240 и 600 мин, находившихся в темноте, а также под воздействием света в течение полугода и года. ИК–спектры образцов, хранившихся в темноте в течение полугода и года, по сравнению с контрольными спектрами имеют весьма незначительные изменения интерференционной картины, формы спектров и интенсивности полос в регистрируемой области.

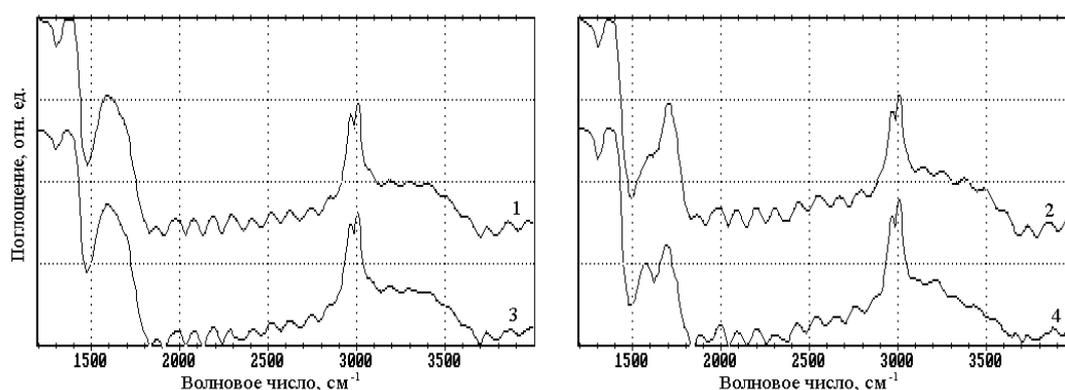


Рис. 1. ИК–спектры образца с временем синтеза 240 мин (1 – в темноте полгода, 2 – на свету полгода, 3 – в темноте год и 4 – на свету год).

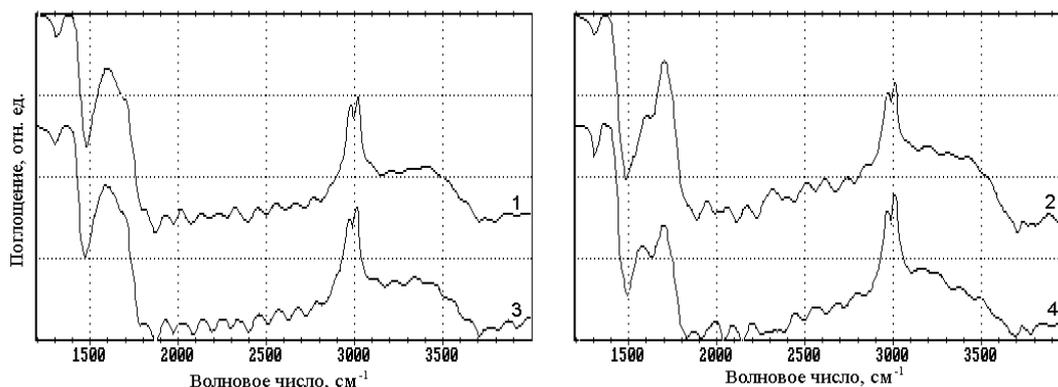


Рис. 2. ИК–спектры образца с временем синтеза 600 мин. Обозначения аналогичны обозначениям рис. 1.

При хранении на свету в исследуемых образцах происходят существенные изменения. Такие образцы изменяют свой цвет, становясь прозрачными с желтоватым оттенком. В их ИК–спектрах происходит существенный сдвиг интерференционной картины, что, возможно, связано с изменением толщины прозрачного слоя пленки в процессе старения; происходят изменения наклона фоновой составляющей; меняется соотношение интенсивностей характерных пиков дублета СН–полосы в области 2800–3200 см⁻¹. Очевидны изменения интенсивности и формы полос поглощения в области 3100–3300 см⁻¹: появляется наплыв, который можно объяснить сдвигом СН–полосы при образовании кольцевых (ароматических) структур. Такое возможно при нарушении одномерности структуры за счет межцепочечных сшивок (схема 1).

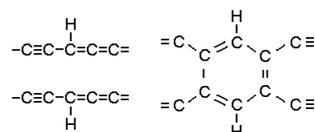


Схема 1.

Наиболее существенные изменения формы и интенсивности полос поглощения происходят в области 1500–1900 см⁻¹. Полоса поглощения в данном интервале является суперпозицией двух пиков: двойных углерод–углеродных и СО–связей. На ИК–спектрах образцов, находящихся на свету в течение полугода, наблюдается уменьшение С=C–связей. В то же время наплыв, возникающий за счет поглощения СО–групп (~1700 см⁻¹), трансформируется в отдельный пик. На ИК–спектрах образцов, находящихся под воздействием света в течение года, мы наблюдаем уменьшение интенсивности этой особенности, одновременно происходит уменьшение поглощения ОН–групп и водородных связей в интервале 2200–3700 см⁻¹. Первое из этих явлений можно объяснить разрушением карбонильных групп и образованием молекул СО₂, которые впоследствии покидают образец. По нашему мнению, карбонильные группы являются устойчивыми структурами и разрушение их в атмосфере воздуха маловероятно, однако эта реакция, пожалуй, единственная, которая способна объяснить данное явление. При этом на ИК–спектрах образцов, находящихся под воздействием солнечного излучения в течение второй половины года, существенного изменения формы и интенсивности полосы поглощения двойных углерод–углеродных связей уже не наблюдается.

Работа выполнена при поддержке регионального гранта РФФИ Урал 01/07/96/475

Перколяция в гетерогенных упругих средах

Радченко Григорий Сергеевич

Ростовский Государственный Университет

Турик Анатолий Васильевич, д.ф.-м.н

grig1980@mail.ru

В литературе хорошо известны и исследованы матричные системы, в которых компоненты геометрически неравноправны и перестановка индексов матричного и диспергированного компонентов в основных уравнениях, определяющих эффективные константы системы, ведет к существенному их изменению. Но такой подход в некоторых случаях неудовлетворительно учитывает взаимодействие внедренных частиц с окружающей их матрицей и, как правило, требует дополнительных предположений о симметрии структуры и характере поляризации компонентов. Чтобы преодолеть данные недостатки, в [1] был разработан самосогласованный метод «эффективной среды», основанный на предположении, что частицы погружены в среду с эффективными свойствами всей гетерогенной системы. В [1] метод применяется только для вычисления диэлектрической проницаемости (ДП) и ведет к интересным явлениям вблизи порога перколяции, таким как, например, гигантское увеличение низкочастотной ДП. Но гетерогенные системы обладают рядом других физических свойств, таких как упругие и пьезоэлектрические свойства. В связи с этим вызывает интерес работа [2], содержащая обзор существующих методов, в которых подход [1] существенно расширен и применен к вычислению эффективных упругих свойств гетерогенной многокомпонентной среды. На основе сделанного в [2] обзора различных подходов была записана система двух уравнений и вычислены эффективные упругие константы моделируемой среды. Но в [2] компоненты среды обладали совершенно нереальными с физической точки зрения свойствами, такими как, например, бесконечная жесткость одного из компонентов. Также среда в [2] предполагалась изотропной по всем направлениям. Эти упрощения были связаны с трудностью решения системы уравнений (1) для определения модулей K^* и G^* .

$$\sum_{j=1}^M f_j \frac{K_j - K^*}{K_j + \frac{2(d-1)}{d} G^*} = 0 \quad (1)$$

$$\sum_{j=1}^M f_j \frac{G_j - G^*}{G_j + H} = 0$$

$$\text{где } H = \frac{G^* (dK^* / 2 + (d+1)(d-2)G^* / d)}{K^* + 2G^*}$$

Здесь f_j - объемные концентрации компонент, d - мерность пространства (нами рассмотрен случай трехмерного пространства), K_j и G_j - продольный и сдвиговой модули компонент, K^* и G^* - продольный и сдвиговой эффективные модули.

В настоящей работе подход [2] применен к сегнетоэлектрической керамике и система уравнений (1) решена как приближенным методом итераций, так и точным методом с использованием встроенных возможностей некоторых программных пакетов для научных вычислений. На основе разработанных программ сделан расчет упругих модулей для трансверсально изотропной среды, которой обычно и является поляризованная пьезокерамика.

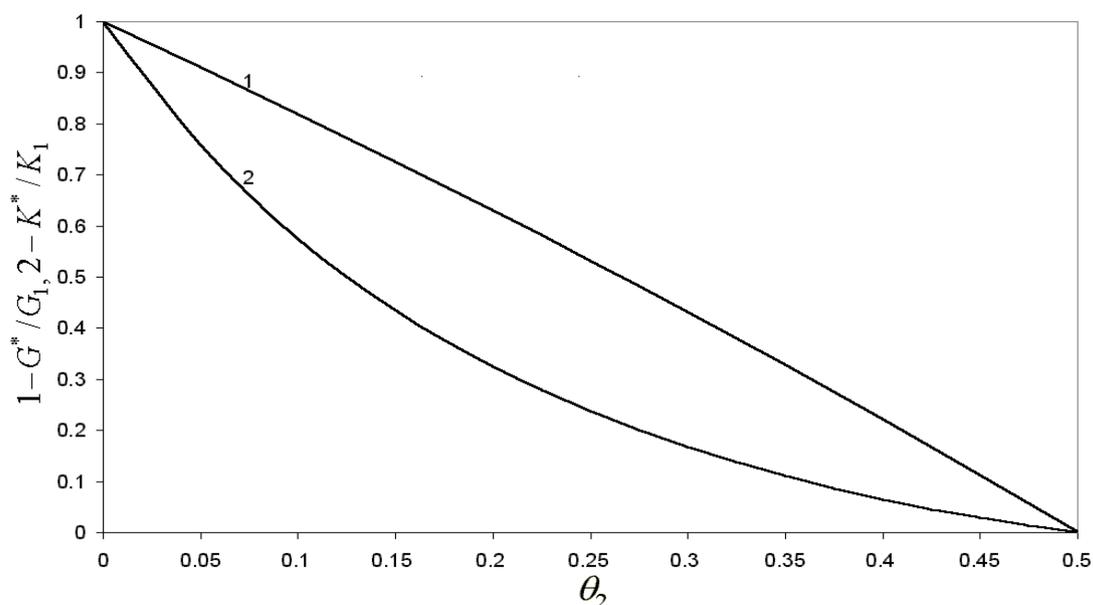


рис. 1. Зависимость эффективных модулей гетерогенной системы типа «статистическая смесь» от концентрации пор с нулевой жесткостью в керамике ПКР-73 (G_1 и K_1 -константы этой керамики)

Из рис 1 видно, что при концентрации пор равной 0,5 система как целое полностью теряет жесткость. Это свидетельствует о наличии перколяционного перехода типа «жесткость-податливость» при данной концентрации. Влияние пористости на продольные (bulk) упругие модули значительно сильнее, чем на сдвиговые (shear) модули. Следовательно, сдвиг в пористой статистической смеси со сферическими частицами реализуется легче, чем продольные (поперечные) возмущения.

Список публикаций:

- [1] Bruggeman D. A. // *Ann. Phys.* 1935. V. 24. P. 636.
 [2] S. Torquato. *Random heterogeneous materials.* Springer, 2002.

Рентгеноструктурные исследования керамики $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$

Ребецкий Александр Игоревич

Тверской Государственный Университет

Большакова Наталья Николаевна, к. ф.-м. н

Скоков Константин Петрович, к. ф.-м. н

s010140@tversu.ru

В настоящей работе исследовалась структура керамического материала системы цирконата – титаната свинца (ЦТС). При замещении ионов Ti^{4+} ионами Zr^{4+} в PbTiO_3 уменьшается тетрагональное искажение элементарной ячейки, и, в конце концов, появляется другая сегнетоэлектрическая (СЭ) фаза – ромбоэдрическая, относящаяся к группе R3m. Граница между тетрагональной и ромбоэдрическими фазами почти не зависит от температуры. Она называется морфотропной границей и обозначает резкий структурный переход в твердом растворе при изменении состава. По разным данным морфотропной границе соответствуют твердые растворы составов $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.535}\text{Ti}_{0.465})\text{O}_3$, $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.53}\text{Ti}_{0.47})\text{O}_3$ [1,2].

Керамика на основе $\text{Pb}(\text{Zr}_{1-x}\text{Ti}_x)\text{O}_3$ обладает ярко выраженными пьезоэлектрическими свойствами. По данным ряда исследователей, коэффициент электромеханической связи и

диэлектрическая проницаемость этой системы достигают наивысших значений вблизи границы между тетрагональной и ромбоэдрической фазами. Предполагается, что близость таких составов к морфотропной границе между СЭ фазами способствует усилению пьезоэлектрических свойств керамики из-за большей легкости переориентации доменов в процессе поляризации. Таким образом, особенности структуры вышеназванных твердых растворов представляют определенный интерес [3,4].

Целью данной работы являлось определение параметров структуры керамики ЦТС, искажения ячейки в зависимости от расстояния от морфотропной границы, проверка согласования модельных представлений об элементарной ячейке с опытными данными, нахождение семейств атомных плоскостей с соответствующими индексами hkl , а также выяснение отличий структуры керамики от структуры соответствующих монокристаллов и сравнение полученных данных с уже известными.

При исследовании структуры образцов $Pb(Zr_{1-x},Ti_x)O_3$, $0.4 \leq x \leq 0.61$ использовался метод дифрактометра (фокусировка Брэгга - Бертрانو, характеристическое излучение линии $Fe_{K\alpha}$ с длиной волны 1.936 \AA).

1. В работе получены данные о параметрах элементарной ячейки неизвестного образца системы ЦТС – $a=4.04 \text{ \AA}$, $c=4.10 \text{ \AA}$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$ и список семейств атомных плоскостей (hkl), что позволило его идентифицировать, как состав с преимущественной концентрацией Ti^{4+} .

2. В результате исследований материала $Pb(Zr_{0.39},Ti_{0.61})O_3$ найдены параметры ячейки, список семейств атомных плоскостей (hkl) (см. рис.1), межплоскостные расстояния d_{hkl} . Установлено, что (тетрагональное) искажение решетки этой структуры относительно кубической больше, чем в предыдущем случае, что подтверждает литературные данные. Дополнительные максимумы, свидетельствующие о наличии другой фазы, либо о другом искажении решетки, обнаружены не были.

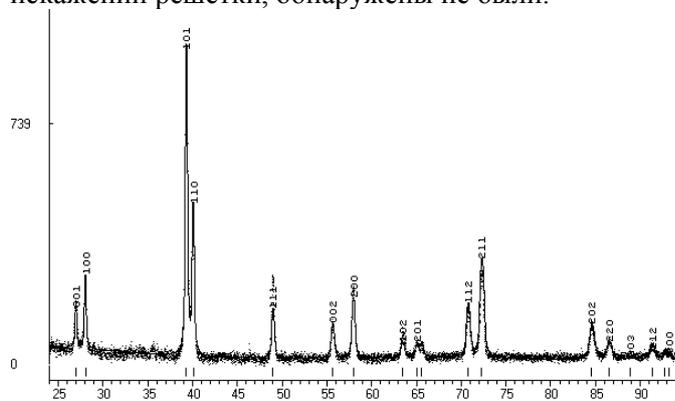


рис.1

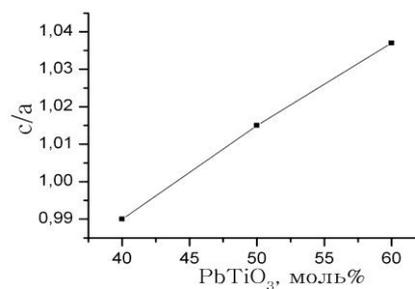


рис.2

3. Программное моделирование решетки показывает, что наличие в центре элементарной ячейки иона циркония Zr^{4+} , а не иона титана Ti^{4+} незначительно изменяет интенсивность соответствующих максимумов, параметры ячейки и семейства плоскостей (hkl) при этом совпадают.

4. Исследования керамики $Pb(Zr_{0.6},Ti_{0.4})O_3$ показали, что это соединение не может быть описано ни ромбическим, ни ромбоэдрическим искажениями, и симметрия его структуры отличается от симметрии групп, соответственно, $Pb_2(a=5.87 \text{ \AA}, b=11.74 \text{ \AA}, c=8.20 \text{ \AA}), R3m, R3c$. По-видимому, структура данного твердого раствора не обладает значительными искажениями, т.к. разделения мультиплетных линий не наблюдается, невелико и количество самих линий.

5. Исходя из дифрактограммы, полученной для образца $Pb(Zr_{0.6},Ti_{0.4})O_3$, можно сделать вывод, что симметрия структуры вблизи концентрационной фазовой границы не описывается ромбоэдрическим искажением с указанными в литературе параметрами решетки [2].

Искажение решетки более всего соответствует тетрагональному, причем, $\frac{c}{a} = 0.99 < 1$.

Возможно, при фазовом переходе система проходит через какую-либо промежуточную фазу, характеризующуюся другой симметрией.

6. Для исследованных составов ЦТС получена концентрационная зависимость тетрагонального искажения элементарной ячейки $\frac{c}{a}$ (рис.2). Видно, что с увеличением концентрации титаната свинца в растворе тетрагональное искажение увеличивается.

Список публикаций:

[1] Глозман И.А., Пьезокерамика. М.1972. 288 с.

[2] Яффе Б., Кук У., Яффе Г., Пьезоэлектрическая керамика. М. 1974. 288 с.

[3] Окадзаки К., Технология керамических диэлектриков. М. 1976. 336 с.

[4] Панич А.Е., Смотраков В.Г., Еремкин В.В., Вусевкер Ю.А., Сборник докладов Международной научно-практической конференции "Фундаментальные проблемы пьезоэлектрического приборостроения", 132-139 (Тверь, 2002).

Изменение локальной структуры катодного материала Ni-Li-O в процессе заряда-разряда батареи

Родина Ирина Сергеевна

Солдатов Александр Владимирович, Мансур Азам

Ростовский Государственный Университет

Солдатов Александр Владимирович, д.ф-м.н

xanes@phys.rsu.ru

Развитие современных технологий требует разработки аккумуляторных батарей с высокой ёмкостью, для чего требуется установить особенности изменения локальной структуры катодных материалов в процессе зарядки- разрядки батареи. Эксперимент выполнен по нашей просьбе доктором Мансуром в Брукхевенской лаборатории Синхротронного излучения, США. Для исследования спектров поглощения в процессе заряда- разряда батареи была изготовлена специальная электрохимическая ячейка. Она состоит из катода на основе оксидов Ni, анода на основе Li, электролитического разделителя- соль Li и майларовых окошечек, позволяющих излучению проходить через ячейку, что позволило измерять коэффициент поглощения непосредственно в процессе цикла заряда- разряда. Нами был проведен теоретический анализ рентгеновского поглощения за К- краем катодного материала Li_xNiO_2 на разных стадиях процесса зарядки- разрядки. Было установлено, что необходимый размер кластера, в котором описываются все остальные закономерности XANES, включает около 90 атома. Расчеты выполнялись методом полного многократного рассеяния, по программе G4 XANES.

На первом этапе были рассчитаны теоретические спектры для оксида NiO_2 . Оксид NiO_2 соответствует полностью заряженному состоянию батареи. Достигнуто хорошее согласие эксперимента с теоретическим спектром, что позволило нам сделать вывод об успешном использовании метода для исследуемых материалов.

Далее был проведен анализ ближней околороговой структуры XANES за К-краем поглощения никеля в катодном материале LiNiO_2 , что соответствует полностью разряженному состоянию батареи.

В теоретическом анализе рассматривалось несколько моделей. Локальная структура этих модельных соединений была взята из литературных источников, использующих данные

рентгеновской дифракции. Наиболее важное отличие этих моделей друг от друга заключается в расстояниях Ni-O в первых сферах. Модели Intermediate, Long и Short отличаются друг от друга главным образом расстоянием Ni-O: для модели Intermediate расстояние Ni-O составляет 1.99Å, для модели Long -2.07Å, для модели Short -1.88Å. Модель JT построена таким образом, чтобы учесть предполагаемое искажение Яна-Тейлера. в октаэдре NiO₆: 2 атома кислорода вдоль оси \vec{c} находятся на расстоянии 2.07Å от центрального атома Ni, а 4 кислорода в плоскости \vec{ab} образуют квадрат с расстояниями Ni-O 1.88Å. Спектр для модели JT лучше согласуется с экспериментальным спектром.

В процессе заряда происходит деинтеркаляция атомов лития из катодного материала. Нами была рассмотрена промежуточные фазы Li_{0.7}NiO₂ и Li_{0.3}NiO₂. Рассмотрим фазу Li_{0.7}NiO₂. Ранее на основе рентгеноструктурного анализа была высказана гипотеза о том, что при понижении концентрации лития происходит переход в моноклинную фазу типа C2/m. С другой стороны ближайшее окружение атома никеля в Li_{0.7}NiO₂, полученное на основе EXAFS анализа не соответствует моноклинной фазе. Для определения структуры Li_{0.7}NiO₂ нами было проведено исследование на основе метода XANES. Теоретическое моделирование спектров XANES этой структуры было выполнено для двух гипотез: 1) Структура Li_{0.7}NiO₂ представляет собой моноклинную фазу, 2) структура Li_{0.7}NiO₂ состоит из двух фаз: 70% фазы LiNiO₂ и 30% NiO₂. Сопоставление с экспериментом показало, что первая гипотеза дает результаты качественно отличающиеся от экспериментальных, в то время как вторая показывает хорошее соответствие. Аналогично была рассчитана фаза Li_{0.3}NiO₂. Оказалось, что наилучшее согласие с экспериментом дает модель LiNiO₂+NiO₂.

Таким образом в результате проведенного исследования определены наилучшие модели локальной структуры катодного материала Li_xNiO₂ на различных стадиях процесса заряда-разряда литий-никелиевых батарей.

Электрофизические свойства структур металл – оксид диспрозия – оксид иттрия – кремний

Родионов Максим Александрович

Пашин Алексей Владимирович

Самарский государственный университет

Рожков Виктор Аркадьевич, д.ф.-м.н

rodionow@rambler.ru

Целью данной работы являлось исследование электрофизических свойств кремниевых МДП-структур с двухслойными диэлектрическими пленками из оксида иттрия и оксида диспрозия. Образцы для исследования изготавливались на кремниевых монокристаллических подложках марки КЭФ-5 и КДБ-4,5 с ориентацией поверхности (100) и (111) соответственно. Перед нанесением диэлектрика кремниевые пластины проходили ультразвуковую мойку в ацетоне в течение 10 минут и затем сушились на воздухе. Двухслойные металлические пленки изготавливались методом термического распыления редкоземельного элемента (РЗЭ) в вакууме при давлении $(2-3) \cdot 10^{-5}$ Тор из молибденовой лодочки на установке типа ВУП-5. На кремниевые подложки последовательно напылялись слои иттрия и диспрозия. Полученные пленки РЗЭ окислялись в трубчатом кварцевом реакторе, помещенном в муфельную печь типа СУОЛ-0.4.4, на воздухе при температуре 500-520°C в течение 40 мин. Контакты к диэлектрическому слою изготавливались вакуумным термическим напылением алюминия через трафарет. Площадь металлического электрода составляла $2,7 \cdot 10^{-3}$ см². С противоположной стороны кремниевой пластины наносился сплошной контакт из алюминия.

Установлено, что вольтамперные характеристики (ВАХ) МДП-структур $\text{Al-Dy}_2\text{O}_3 - \text{Y}_2\text{O}_3 - \text{Si}$, измеренные на постоянном токе, почти симметричны, а электропроводность образцов удовлетворительно описывается механизмом Пула-Френкеля, который представляет собой термическую генерацию свободных носителей заряда из объемных ловушек в зону проводимости диэлектрика, облегченную электрическим полем. Коэффициенты выпрямления для различных образцов лежали в пределах 1,1-2,5. Величины удельного сопротивления двухслойных пленок оксидов редкоземельных элементов, определенные из ВАХ, лежали в пределах 10^{12} - 10^{15} Ом·см.

Исследование свойств границы раздела полупроводник – диэлектрик в МДП-структурах осуществлялось с помощью измерения высокочастотных вольт - фарадных характеристик (рис.1). На рисунке приведена типичная нормированная к емкости диэлектрика вольт - фарадная характеристика структуры $\text{Al-Dy}_2\text{O}_3 - \text{Y}_2\text{O}_3 - \text{pSi}$, а также теоретически рассчитанная характеристика для идеальной МДП-структуры. По сдвигу экспериментальной вольт – фарадной кривой относительно идеальной определена величина поверхностной плотности встроенного заряда в диэлектрике $Q_{ss} = 7,6 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Кл}}{\text{см}^2}$ и эффективная плотность поверхностных состояний $N_{ss} = 4,7 \cdot 10^{11} \text{см}^{-2}$ при потенциале плоских зон. Величины коэффициентов перекрытия по емкости для измеренных структур лежали в пределах 9-12.

Исследование зависимости тангенса угла диэлектрических потерь $\text{tg}\delta$ и активной составляющей проводимости G от приложенного напряжения V при частоте сигнала 1 МГц показало, что характеристики $\text{tg}\delta$ от V имеют максимум при напряжении плоских зон и тенденцию к насыщению в области напряжений, соответствующих аккумуляции и инверсии на поверхности полупроводника. При этом величины тангенса угла диэлектрических потерь в области напряжений, соответствующих аккумуляции поверхности полупроводника основными носителями заряда, превышали аналогичные значения для области инверсии. На кривых G от V наблюдается плавный рост проводимости при переходе от обеднения к обогащению и насыщение ее в области напряжений, соответствующих инверсии и аккумуляции на поверхности полупроводника. Значения проводимости для исследуемых структур при различных напряжениях лежат в пределах от 0,006 до 0,85 мСм. Величина $\text{tg}\delta$ изменяется в пределах от 0,027 до 0,26.

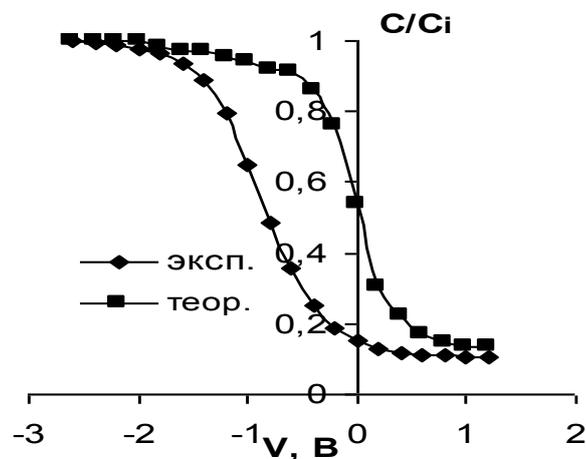


рис. 1

Методом кинетических зависимостей емкости, при неравновесном обеднении поверхности полупроводника, основными носителями заряда, создаваемом прямоугольными импульсами напряжения, определены значения скорости поверхностной генерации S и времени жизни неосновных носителей заряда τ . Величина S у исследуемых структур изменяется в пределах 33-47 см/с, а τ принимает значения 0,2-0,4 мкс.

Проведенные исследования показывают, что изученные структуры обладают высокими коэффициентами перекрытия по емкости, а также хорошими изолирующими свойствами и перспективны для создания МДП-варикапов. Высокое качество границы раздела полупроводник-диэлектрик позволяет использовать двухслойные пленки исследованных оксидов РЗЭ в качестве пассивирующих покрытий полупроводниковых приборов и подзатворного диэлектрического слоя полевого МДП-транзистора.

Учет предела растворимости примеси при диффузии из истощающегося источника

Румянцев Иван Михайлович

Московский инженерно-физический институт

Петров Валерий Иванович, к.т.н

ivanr@sim.ru

Стабильность структуры материалов, содержащих примеси, как правило, определяется процессами перераспределения примесей между твердым раствором и обособленными фазами. Подвижность примесей в твердых материалах лимитируется диффузионными процессами, поэтому важной характеристикой любого материала, содержащего примеси, являются коэффициенты диффузии D_i , $i=1,2..n$ примесей. В экспериментах по определению диффузионной подвижности с применением радиоактивных изотопов чаще всего используется метод измерения интегральной активности остатка образца $N(x,t)$. Эта функция связана с распределением концентрации по глубине образца:

$$N(x,t) = A \int_x^{\infty} c(x',t) \cdot \exp[-\mu(x' - x)] dx', \quad (1)$$

где μ – линейный коэффициент поглощения радиоактивного излучения изотопа, $см^{-1}$; A – константа, связывающая удельную активность слоя на глубине x с концентрацией диффузанта, $имп/см^2с$; x' – переменная интегрирования, $см$, t – время, $с$.

Применительно к эксперименту зависимость обычно рассматривают для нескольких краевых условий одномерной диффузии в полубесконечный образец. Причем чаще всего экспериментаторы стараются реализовать так называемый «мгновенный» источник ограниченной емкости, когда все вещество диффузанта Q_0 при $t < 0$ сосредоточено в слое нулевой толщины, а при $t > 0$ – мгновенно оказывается растворенным в образце. Выражение для концентрации имеет вид:

$$c(x,t) = \frac{Q_0}{\sqrt{\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right) \quad (2)$$

Q_0 количество вещества в слое; D – коэффициент диффузии, $см^2/с$.

Это приближение успешно используется, когда велики предел растворимости и диффузионная подвижность.

В данной работе предлагается решение уравнения диффузии из истощающегося источника ограниченной емкости и при низком пределе растворимости. Решение было найдено методом Лапласа с привлечением линейного уравнения Вольтерра 2-го рода. Получено выражение для профиля концентрации примеси по глубине. Если ввести обозначения: α – фактор скорости (характеризует скорость поступления атомов диффузанта от истощающегося источника к точке начала объемной диффузии), c^{-1} ; c^* – предел растворимости диффузанта,

$\beta = \frac{Q_0}{2c^*} \sqrt{\frac{\alpha}{D}}$ – параметр, $\tau = \alpha t$ – безразмерное время, тогда:

$$\frac{c(z, \tau)}{c^*} = \begin{cases} 2\beta \cdot \exp(-z^2) \cdot \left[\frac{\Phi(z + y_2 \sqrt{\tau}) - \Phi(z + y_1 \sqrt{\tau})}{y_1 - y_2} \right], & z \geq 0, \tau \geq 0, \beta > 1 \\ \frac{2\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}} \operatorname{Im} \left\{ \Phi(z + y_2 \sqrt{\tau}) \right\}, & z \geq 0, \tau \geq 0, \beta < 1 \end{cases} \quad (3)$$

где $\Phi(v) = \exp(v^2) \cdot \operatorname{erfc}(v)$, $\operatorname{erfc}(v) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^v \exp(-y^2) dy$ – дополнительный интеграл

вероятности, $z = x / \sqrt{4Dt}$ – безразмерная глубина, $y_{1,2} = \beta \pm \sqrt{\beta^2 - 1}$.

В случае, когда при обработке экспериментов толщину образца можно считать бесконечной, а поглощение излучения незначительным на расстояниях, сопоставимых с глубиной диффузионного проникновения примеси в образец L_D , то есть $L \gg L_D$, а $\mu L_D \ll 1$, выражение для интегральной активности (1) упрощается

$$N(x, t) = A \int_x^\infty c(x', t) dx', \quad x \geq 0, t > 0. \quad (4)$$

Подставляя выражение для концентрации примеси (3) в формулу (1), получим выражение для интегральной активности

$$\frac{N(z, \tau)}{AQ_0} = \begin{cases} \operatorname{erfc}(z) + \frac{\exp(-z^2)}{y_1 - y_2} [y_2 \Phi(z + y_1 \sqrt{\tau}) - y_1 \Phi(z - y_2 \sqrt{\tau})], & \beta > 1; \\ \operatorname{erfc}(z) + \frac{\exp(-z^2)}{\sqrt{1 - \beta^2}} \operatorname{Im} [y_2 \Phi(z + y_1 \sqrt{\tau})], & \beta < 1, z \geq 0, \tau > 0, \end{cases} \quad (5)$$

Выражения (3) и (5) можно использовать для обработки реальных экспериментов. Для примера представим эксперимент по диффузии железа в литой бериллий при температуре 990°C, данные которого обработаны с помощью модели (5), ($D = (7,8 \pm 0,2) \cdot 10^{-10} \text{ см}^2/\text{с}$). В данном эксперименте реализовался промежуточный случай между традиционными приближениями: «мгновенный» источник ($D = (3,2 \pm 0,8) \cdot 10^{-10} \text{ см}^2/\text{с}$) и постоянная концентрация ($D = (8,7 \pm 0,5) \cdot 10^{-10} \text{ см}^2/\text{с}$). Видно, что обработка решением (5) вносит меньшую погрешность определения D за счет выбора модели. Обратим внимание, что у экспериментатора появилась возможность оценивать степень истощения источника τ и влияние предела растворимости путем подгонки параметра β . Для рассматриваемого примера ($\tau = 343$, $\beta = 9,2$).

Таким образом, в работе, впервые получено решение задачи о диффузии из истощающегося источника с учетом предела растворимости. Модель можно рекомендовать для обработки результатов во всем диапазоне времени отжига и для любой скорости истощения источника. Применение найденных решений позволило уточнить данные для диффузии примесей в бериллии.

Зависимость интенсивности рентгеновского излучения частицы от ее формы, ориентации и размера

Рыбакова Анастасия Александровна

Баранов Евгений Олегович

Иркутский Государственный Университет

Павлинский Гелий Вениаминович, д.ф-м.н

pavlinsky@chem.isu.ru

Влияние размера частиц на интенсивность рентгеновской флуоресценции является одним из важнейших факторов, определяющих точность рентгенофлуоресцентного анализа порошковых материалов. Особенно значимо это влияние, когда рассматривается рентгеновская флуоресценция отдельных частиц или их набора, распределенного с некоторой скважностью на подложке.

При достаточно крупных частицах интенсивность рентгеновской флуоресценции существенно зависит также от формы частиц. Одним из вариантов задания формы частицы является ее представление в виде куба. Существующие решения этой простейшей задачи предполагают, что первичное излучение падает на грань куба и отбрасывается с той же грани. В работе [1] такая частица рассматривается как элемент слоя толщиной a и площадью a^2 (см рис.2б). Другое более правильное решение [2] учитывают возможность попадания первичного излучения на боковую грань куба и выход флуоресцентного излучения через другую его грань.

Нами получено выражение для интенсивности рентгеновской флуоресценции частицы в случае, когда параллельный пучок первичного рентгеновского излучения падает на грань куба под прямым углом, а рентгеновская флуоресценция отбрасывается в направлении, нормальном к другой грани куба. Результаты расчетов интенсивности медной кубической частицы, выполненные для этого случая существенно отличаются от полученных в работах [1,2] (см. рис.1).

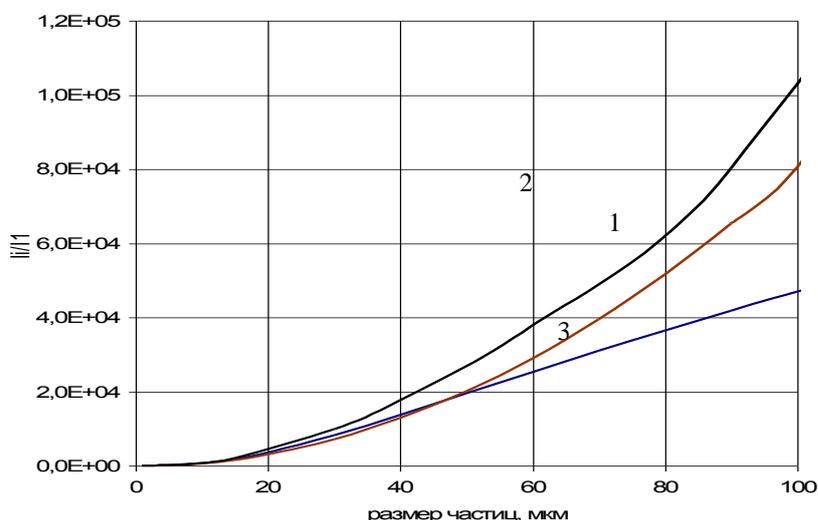


рис. 1. Зависимости интенсивности рентгеновской флуоресценции кубической частицы от ее размера, построенные: 1 - по данным работы [1]; 2 – по данным работы [2]; 3 – по полученному нами соотношению.

Из рис. 1 следует, что при малых размерах частицы, когда влияние поглощающих свойств облучаемого материала невелико, рассматриваемые зависимости отличаются слабо. Однако для большой по размеру кубической частицы при предложенной нами ориентации интенсивность рентгеновской флуоресценции растет пропорционально ее линейным размерам (величине ребра). Действительно, с учетом поглощающих свойств материала частицы ее рентгеновская флуоресценция может быть зарегистрирована только от заштрихованного объема (см рис. 2а), тогда как при ориентации, рассмотренной в работах [1,2], интенсивность в первом

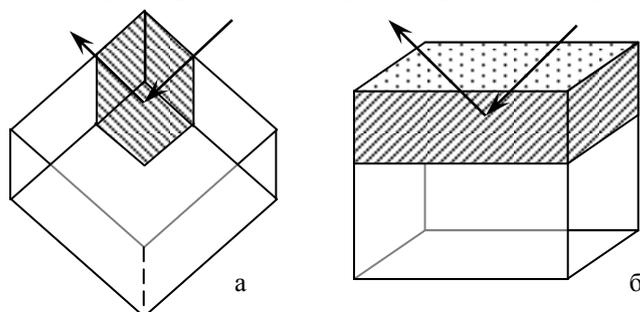


рис. 2. Излучающий объем при различных ориентациях кубической частицы.

приближении оказывается пропорциональной площади грани куба. (см. рис. 2б).

Существенное влияние ориентации частицы на получаемый результат требует рассмотрения интенсивности рентгеновской флуоресценции

шарообразной частицы. Действительно, шарообразная форма является усреднением всех возможных ориентаций частицы. Такую частицу характеризует один параметр, являющийся ее радиусом. Этот радиус характеризует как размер так и форму частицы, которая не обязательно должна быть кубом.

Нами получено выражение для интенсивности рентгеновской флуоресценции шаровой частицы при условии, что эта интенсивность отбирается в направлении, нормальном к направлению первичного пучка. Рассчитано соотношение параметров кубической частицы и радиуса шаровой частицы для различных ориентаций куба.

Список публикаций:

- [1]. P. F. Berry, T. Furuta and J. R. Rhodes // *Adv. X-ray Anal.* 1969, vol. 12, p. 612.
 [2]. R. D. Bonetto, J. A. Riveros // *X-Ray Spectrometry*, 1985, vol. 14, No 1, p. 2-7.

Энергетическое распределение ловушек в монокристаллах C_{60} Самодуров Александр Алексеевич

Тамбовский государственный университет имени Г.Р. Державина

Лопатин Дмитрий Валерьевич, к.ф.-м.н

lopatin@tsu.tmb.ru

Ранее в работе [1] было выявлено, что гладкая температурная зависимость спектров фотопроводимости монокристаллов C_{60} нарушается при $T_1 \sim 260$ К и $T_2 \sim 315$ К. Первое связано с фазовым переходом fcc-сc в монокристаллах C_{60} при данной температуре, а резкое изменение спектров при T_2 , вероятно, связано с имеющимися центрами захвата носителей заряда вследствие наличия дефектов различной природы в монокристаллах C_{60} . Определение пространственного и энергетического распределения ловушек в монокристаллах C_{60} являлось целью данной работы.

В работе исследовали монокристаллы C_{60} , выращенные в ИФФТ РАН. Была использована методика, развитая в рамках теории токов, ограниченных пространственным зарядом (ТОПЗ) на основе численного решения, предложенного Бонхэмом и Джарвисом для режима ТОПЗ [2].

При комнатной температуре была получена $J-U$ -характеристика для монокристалла C_{60} (см. рис.1) Как видно из рисунка $J \sim U^2$, на основании чего можно сделать вывод, что ток в режиме ТОПЗ определяется наличием мелких ловушек; более того, проявляется только один уровень ловушек.

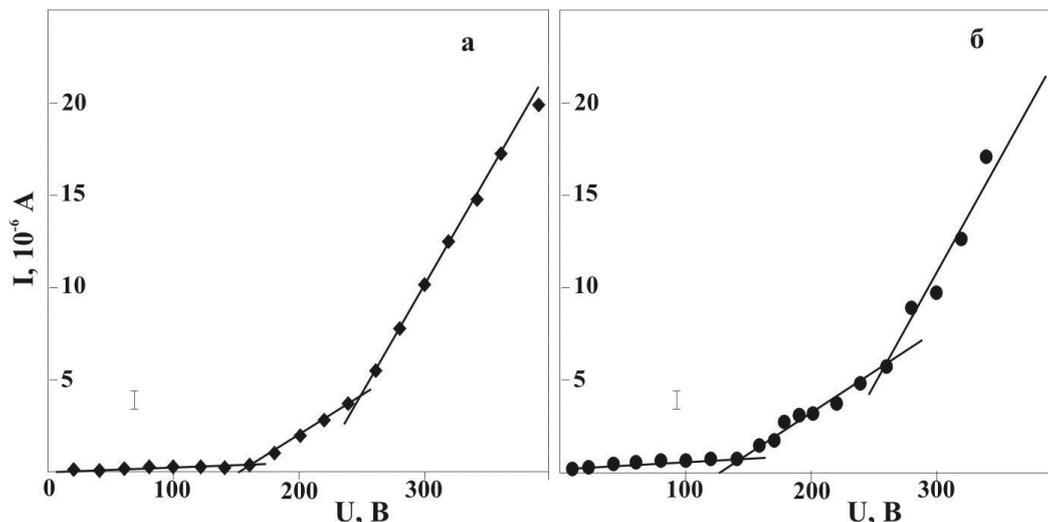


рис. 1. $J-U$ -характеристика для монокристалла C_{60} при комнатной температуре. Электроды – серебро; а) толщина образца $L=0,1$ см, б) толщина образца $L=0,3$ см.

По экспериментальным данным из соотношения (1) можно оценить величину E_t , выражающую разность энергий между зоной проводимости и уровнем ловушки.

$$\theta = \frac{N_c}{N_t} \exp\left(-\frac{E_t}{kT}\right) \quad (1),$$

где θ – величина, характеризующая распределение ловушек, N_c – плотность состояний в интервале энергии kT у края зоны проводимости, N_t – плотность ловушек на энергетическом уровне E_t . Поскольку $J = \theta \cdot f(U, L)$, то была получена температурная зависимость тока при фиксированном значении U . Это дало независимый способ определения величины $\theta = \theta(T)$ (см. рис.2), зная которую, из уравнения (1) получено значение $E_t \sim 0,4$ эВ. В работе [3] показано, что данный энергетический уровень в монокристаллах C_{60} может быть связан с наличием в кристалле различных дефектов (X-ловушки).

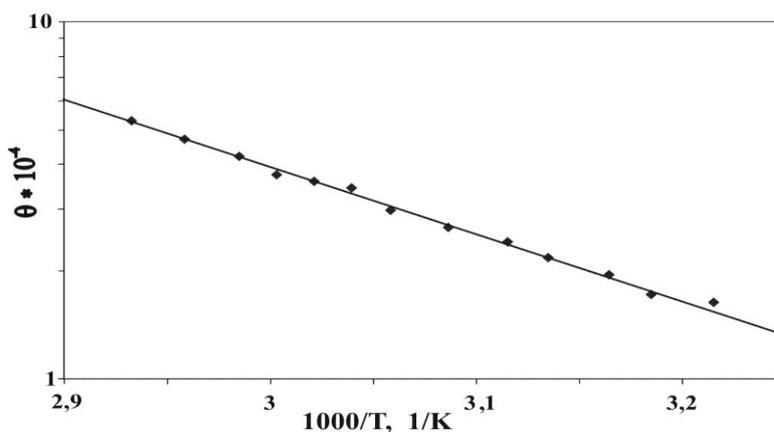


рис. 2. Зависимость величины θ в логарифмических координатах от обратной температуры $1/T$.

Величину N_t можно оценить теоретически, используя значение напряжения предельного заполнения ловушек $U_{TFL}=250$ В, при котором наклон кривой на рис. 1 резко возрастает. Резкое нарастание тока указывает на начало режима ТОПЗ в условиях предельного заполнения ловушек, когда нарастание тока в основном обусловлено свободными носителями заряда. В этом случае из соотношения $N_t = \frac{\varepsilon_0 U_{TFL}}{eL^2}$ получаем $N_t=5,8 \cdot 10^{16} \text{ м}^{-3}$. Найденное значение на несколько порядков отличается от вычисленного по формуле (1) $N_t=6,2 \cdot 10^{21} \text{ м}^{-3}$. Это указывает на то, что резкое нарастание тока при U_{TFL} нельзя просто связать лишь с заполнением ловушек в объеме.

В работе в рамках теории токов, ограниченных пространственным зарядом проведено исследование пространственного и энергетического распределения ловушек в монокристаллах C_{60} . Получены значения уровня ловушки E_t , плотности ловушек N_t .

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 02-02-17571) и ФЦП “Фуллерены и атомные кластеры”.

Список публикаций:

[1] Golovin Yu. I., Lopatin D.V., Nikolaev R.K., Umrikhin A.V., Fullerenes, nanotubes, and carbon nanostructures, **12**, 1, 81-85 (2004).

[2] Поуп М., Свенберг Ч. Электронные процессы в органических кристаллах. М., 1985. Т. 1. С. 545.

[3] Осипьян Ю.А., Кведер В.В., Материаловедение, 1, 2-6 (1997)

Влияние водорода на электрические свойства нанокристаллических пленок на основе сплава Sn-O-Y

Самохина Оксана Ивановна

Ситников Александр Викторович

Воронежский Государственный Технический Университет

Калинин Юрий Егорович, д.ф.-м.н

michaelkopitin@mail.ru

В последнее время в связи с возрастанием внимания к молекулярному водороду как альтернативе органическому топливу продолжается поиск веществ, которые могли бы выступать в качестве датчиков водорода как в вакууме, так и в обычной атмосферной среде. Для детектирования водорода и других газов (CH_4 , CO , CO_2 , NH_3 и др.) чаще всего используются оксиды олова, активируемые палладием, чувствительность которых усиливается, если в них создана нанокристаллическая структура. Активация оксида олова осуществляется за счет увеличения поверхностной энергии межзеренных границ, доля которых существенно возрастает при размерах зерен 10-20 nm . Одной из основных проблем, возникающих при использовании такого рода материалов, является нестабильность свойств, связанная с ростом кристаллических зерен при повышенной температуре, соответствующей максимальной газовой чувствительности датчика. Для того чтобы получить малый размер зерна с приемлемой стабильностью структуры, пленки оксида олова легируют различными элементами, стабилизирующими нанокристаллическую структуру.

В настоящей работе приведены данные о влиянии молекулярного водорода на удельное электрическое сопротивление (ρ) нанокристаллических пленок Sn-O-Y, в которых иттрий выступает в качестве катализатора и, одновременно, стабилизирует размер зерна.

Для получения наноструктур оксидов олова, стабилизированных иттрием, был использован метод ионно-лучевого распыления составной мишени и осаждения продуктов распыления на ситалловой подложке. Мишень состояла из олова чистотой 99,98 % размером

280×80Ч0,5 мм³, на поверхности которой с переменным шагом закреплялись пластины иттрия размером 80×10Ч1 мм³, что позволяло в одном технологическом цикле получать пленки толщиной 1-1,5 мкм с непрерывным распределением иттрия от 0,4 до 5 ат. % по длине подложки. Процесс распыления проводился в атмосфере, с парциальным давлением Ar 2,8·10⁻⁴ Торр и O₂ 4,2·10⁻⁴ Торр и с суммарным давлением 7·10⁻⁴ Торр. Состав композиционных пленок определялся электроннозондовым рентгеновским микроанализатором по пяти измерениям, взятым с различных участков пленки, с последующей полиномной экстраполяцией состава по длине подложки. Были исследованы 6 образцов с различным содержанием иттрия. Удельное электрическое сопротивление измерялось потенциометрическим методом с относительной погрешностью 1 - 2 %.

В исходном состоянии пленки всех составов находятся в аморфном состоянии и имеют очень высокое удельное электрическое сопротивление ($\rho \approx 10^{10}$ Ом·см) при комнатной температуре и очень низкую чувствительность к водороду. Чтобы снизить ρ и перевести аморфную структуру в нанокристаллическое состояние, проводился нагрев аморфных образцов в атмосфере аргона при $P = 380$ Торр со скоростью 4 К/мин до температуры $T_k + 20$ °С, кратковременный отжиг (не более 5 минут) с последующим охлаждением. По резкому изменению электросопротивления в процессе перехода из аморфного в кристаллическое состояние определялась температура кристаллизации T_k . В термообработанных таким образом образцах исследовалось влияние молекулярного водорода на электрические свойства оксидов олова, легированных иттрием.

Чтобы определить оптимальную температуру, при которой наблюдаются максимальные изменения ρ , проведены изотермические отжики всех образцов при 200, 250, 300 и 350 °С в среде аргона $P_{Ar} = 380$ Торр и аргона $P_{Ar} = 372,4$ Торр с водородом $P_H = 7,6$ Торр. В наиболее чувствительных к водороду сплавах Sn_{48,4}O_{49,4}Y_{2,2} и Sn_{48,3}O_{46,9}Y_{4,8} при 200 °С сопротивление изменяется незначительно (~20%). Максимальные изменения электрического сопротивления, связанные с наличием молекулярного водорода в атмосфере аргона наблюдаются при температуре $T = 350$ °С, что свидетельствует о значительной роли термической активации в процессе взаимодействия водорода с нанокристаллической твёрдотельной средой оксида олова, легированной иттрием.

При $T = 350$ °С циклический напуск аргона и молекулярного водорода в аргоновую газовую среду приводит к значительному изменению удельного электрического сопротивления ρ предварительно термообработанных плёнок Sn_{48,4}O_{49,4}Y_{2,2}. Напуск аргона в вакуумную камеру с остаточным давлением $P = 10^{-4}$ Торр приводит к увеличению ρ на 70-75 % в течении 20-и минутной выдержки. Напуск молекулярного водорода с парциальным давлением $P = 7,6$ Торр в аргоновую среду приводит к резкому уменьшению электрического сопротивления на 150-175 % за время меньше одной минуты. Удаление водорода и напуск аргона вновь приводит к скачкообразному росту ρ примерно на ту же самую величину. Повторение подобных циклов до 7 и более сопровождается почти полной воспроизводимостью результатов изменений электрического сопротивления при действии водорода и аргона.

Аналогичные закономерности изменения кривой $\Delta\rho/\rho$ наблюдаются при напуске молекулярного водорода при $P = 7,6$ Торр в воздушную среду с $P = 372,4$ Торр. Для тонкой плёнки Sn_{48,4}O_{49,4}Y_{2,2} также наблюдаются скачки $\Delta\rho/\rho$, однако меньшей величины (30-60 %).

Наиболее впечатляющие результаты по чувствительности к водороду получены на плёнке Sn_{48,9}O_{49,9}Y_{1,2} в результате изотермического отжига при $T = 350$ °С. Воздушная среда почти полностью стабилизирует электрическое сопротивление плёнки. Изменения величины ρ в воздушной среде составляет 25-50 % за первые 5-10 минут, дальнейшая выдержка не приводит к изменению ρ . Введение водорода с $P = 7,6$ Торр приводит к резкому скачкообразному уменьшению ρ (в течении нескольких секунд) 700-800 %. При откачке водорода электрическое сопротивление восстанавливается до исходных значений.

На основании полученных результатов можно сделать вывод о перспективности применения нанокристаллических пленок на основе сплава Sn-O-Y в качестве чувствительного слоя при разработке датчиков водорода.

Электрические свойства, магниторезистивный эффект и магнитные свойства нанокompозитов $\text{Co}_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$

Самсонов Сергей Владимирович

Копытин Михаил Николаевич, Кудрин Алексей Михайлович

Воронежский Государственный Технический Университет

Калинин Юрий Егорович, д.ф-м.н

samsonov.serg@mail.ru

Гранулированные композиционные материалы представляют собой гетерогенные искусственно созданные среды, сформированные из наноразмерных металлических частиц, распределенных в диэлектрической матрице. Такая структура обуславливает необычные физические свойства данных материалов, к числу которых относятся возможность изменения удельного электросопротивления композитов на несколько порядков в зависимости от состава материала, гигантское магнитосопротивление, аномальный эффект Холла, необычные магнитооптические свойства, и др. Степень проявления этих свойств зависит от состава как металлической, так и диэлектрической фаз. Целью данной работы было изучение электрических, магниторезистивных и магнитных свойств гранулированных нанокompозитов $\text{Co}_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$, с диэлектрической матрицей, обладающей сегнетоэлектрическими свойствами.

Образцы толщиной 1,6 – 4,8 мкм были получены ионно-лучевым распылением мишени Co с навесками из LiNbO_3 на ситалловые подложки. Распыление проводилось в атмосфере аргона и кислорода при парциальном давлении $4 \cdot 10^{-4}$ Торр и $3,6 \cdot 10^{-5}$ Торр ($3,9 \cdot 10^{-5}$ Торр) соответственно. Неравномерное расположение навесок на поверхности мишени позволило получить образцы, состав которых изменялся в широких пределах, в зависимости от расположения подложек относительно мишени.

Исследование температурных зависимостей удельного электросопротивления гранулированных нанокompозитов $\text{Co}_x(\text{LiNbO}_3)_{100-x}$ в области температур 20 – 850 °C, осуществлялись двухзондовым потенциометрическим методом. Высокотемпературные измерения $\rho(T)$ проводились в вакууме с остаточным давлением не хуже $1 \cdot 10^{-4}$ Торр, что исключает окисление материала в процессе исследования. Изучение температурных зависимостей удельного электросопротивления показало, что по своему поведению зависимости $\rho(T)$ можно разделить на две группы. В первой группе ($x < 37$ ат.%) с ростом температуры до 400 °C удельное электросопротивление ρ уменьшается (композиты с отрицательным температурным коэффициентом электросопротивления (ТКС)), а в области более высоких температур наблюдается «плато» с резким спадом ρ при температуре кристаллизации аморфной матрицы ($T_x \sim 580$ °C). В кристаллическом состоянии зависимость $\rho(T)$ композитов этой группы характеризуется отрицательным ТКС, модуль которого растет с увеличением концентрации диэлектрической фазы, имеет более высокие значения по сравнению с аморфной структурой. При комнатной температуре величина удельного электросопротивления таких композитов после кристаллизации диэлектрической фазы более чем на порядок выше, чем в исходном состоянии.

Ко второй группе относятся композиты, с концентрацией металлической фазы $x > 37$ ат.%, температурный коэффициент электросопротивления которых изменяется от отрицательного до положительного в температурном интервале до 400 °C. После

кристаллизации диэлектрической матрицы (при $T_x \sim 400 - 580$ °C) композиты имеют положительный ТКС. При комнатной температуре величина ρ этих композитов более чем на порядок ниже, чем в исходном аморфном состоянии.

Магнитные свойства образцов были исследованы с помощью вибрационного магнетометра. Магниторезистивный эффект (MR – эффект) в нанокompозитах измерялся в магнитных полях от 0 до ± 11 кЭ.

Экспериментальные данные показали, что на концентрационных зависимостях MR – эффекта присутствуют два хорошо выраженных максимума для композитов, полученных при $P(O_2) = 3,6 \cdot 10^{-5}$ Торр, и три максимума при $P(O_2) = 3,9 \cdot 10^{-5}$ Торр, причем 2-й максимум ($x \sim 58$ ат.%) для обоих кривых имеет одно и тоже положение, хотя и различается по абсолютному значению.

На полевых зависимостях электросопротивления при концентрации ферромагнитной фазы $x > 32$ ат.% был обнаружен гистерезис MR – эффекта. Для выяснения природы такого поведения зависимостей $R(H)$ были проведены исследования магнитных свойств данных композитов. Они выявили наличие магнитного упорядочения нанокompозитов с $x > 32$ ат.% при комнатной температуре. Однако совпадение величины коэрцитивной силы и гистерезиса MR – эффекта наблюдается только для образцов с $x > 65$ ат.%.

Проведенные исследования выявили ряд особенностей, характерных для нанокompозитов $Co_x(LiNbO_3)_{100-x}$: наличие 2-х видов зависимости $\rho(T)$ (для различной концентрации металлической фазы); присутствие нескольких максимумов на концентрационных зависимостях MR – эффекта; гистерезис $R(H)$ и магнитное упорядочение при комнатной температуре для композитов с концентрацией кобальта $x > 32$ ат.%.

Для объяснения наблюдаемых свойств можно предположить наличие дополнительной диэлектрической антиферромагнитной оболочки, формирующейся в процессе получения за счет окисления поверхности гранул Co.

Влияние электронной подсистемы на внутреннее трение титаната бария

Сафонов Денис Иванович

Воронежский Государственный Технический Университет

Гриднев Станислав Александрович, д.ф-м.н

densaf@yandex.ru

Физика сегнетоэлектрических и родственных явлений и тесно переплетающаяся с ней физика структурных фазовых переходов принадлежат к важнейшим и быстро развивающимся разделам фундаментальной физики твердого тела, а сегнетоэлектрические материалы благодаря уникальным физическим свойствам находят все более широкое применение в опто- и акустоэлектронике, информатике и измерительной технике, а также в других отраслях современной промышленности.

Вклад свободной энергии электронной подсистемы в свободную энергию решетки, взаимодействие электронов с «мягкой» сегнетоэлектрической модой приводит к ряду принципиально новых физических явлений в сегнетоэлектриках и сегнетоэластиках. А поскольку изучение внутреннего трения является наиболее информативной методикой в исследовании материалов, то по его изменению в зависимости от состояния электронной подсистемы можно сделать ряд важных заключений о взаимодействии плоских дефектов

структуры (доменных границ) с заряженными точечными дефектами в кристалле при разной концентрации носителей заряда.

В данной работе изучено влияние электронной подсистемы на все три фазовых перехода в керамическом титанате бария, содержащего, в одном случае, примеси Co и Ca, в другом случае, легированного церием (в чистом BaTiO₃, который, как известно, является модельным сегнетоэлектриком, фазовые переходы происходят при температурах $T_{C1} \approx 90^\circ\text{C}$, $T_{C2} \approx 0^\circ\text{C}$ и $T_{C3} \approx 120^\circ\text{C}$). Для анализа влияния электронной подсистемы проводились измерения внутреннего трения и модуля упругости при различных значениях электропроводности образцов при комнатной температуре (также попутно измерялись зависимости диэлектрической проницаемости и проводимости образцов от температуры для более точного определения точек фазовых переходов). Внутреннее трение измерялось методом обратного крутильного маятника в диапазоне инфразвуковых частот. Электропроводность в случае образцов с примесью Co и Ca изменялась путем их длительного отжига в контакте поверхностей с графитом.

Было отмечено аномальное поведение внутреннего трения вблизи точек фазовых переходов, а также заметное его увеличение при верхнем фазовом переходе с ростом концентрации носителей заряда. При этом было обнаружено уменьшение модуля упругости материала во всем температурном диапазоне, в котором проводились измерения.

На основе анализа работы [1] и полученных экспериментальных данных в настоящей работе увеличение внутреннего трения можно объяснить ослаблением взаимодействия доменных границ с заряженными дефектами в результате экранирования электрического поля точечного дефекта в границе домена из-за увеличения концентрации носителей. Можно также предположить, что экранирование заряженных точечных дефектов делает материал более «мягким», т.е. уменьшает его модуль упругости.

Список публикаций:

[1] Gridnev S.A., Darinskii B.M., Netchaev V.N. Influence of electron conductivity on internal friction of semiconductive barium titanate // *Ferroelectrics*, 1982, v. 46, N 1/2, p. 5-11.

Удельная теплоемкость нанокристаллических тел

Сенченко Алексей Владимирович

Сачков Виктор Иванович

Томский политехнический университет

Сачков Виктор Иванович

vicsachkov@mail2000.ru

Общепринято полагать, что уменьшение взаимодействия атомов, лежащих в приповерхностном слое кристаллического материала, должно приводить к увеличению межатомных расстояний. Указание на данный эффект было сделано Ленардом-Джонсом [1]. Структурные суммы и изменение молекулярных радиусов в гранецентрированной структуре ($m=6$, $n=8$) были подсчитаны Гольдером [2] для атомов, лежащих на грани куба (100) и на различных расстояниях от нее. В поверхностном слое найдено увеличение межплоскостного расстояния a на 11%. Этот эффект быстро уменьшается при переходе от поверхностных слоев внутрь кристалла и уже на расстоянии $5a$ расширение составляет только 2%. В работе Д. Ногла и Р. Аллена [3] предложена простая модель динамики кристаллической решетки (МДКР) с учетом поверхностных вкладов. МДКР предполагает, что влияние поверхностного вклада может быть учтено введением двухмерного фононного спектра, причем акустическая ветвь фононного спектра моделируется синусоидой с амплитудой ω_A , оптическая ветвь – постоянной частотой ω_0 . Поверхностная зона Бриллюэна аппроксимируется кругом.

Модель динамики кристаллической решетки позволяет получить простое выражение для удельной поверхностной теплоемкости C_S . В гармоническом приближении и в приближении ближайших соседей для поверхностных вкладов типа (100), (110) и (111) гранецентрированной кубической решетки получены относительные изменения поверхностных частот по сравнению с объемными. С параметрами модели динамической кристаллической решетки, подогнанными под экспериментальные данные по фоновым спектрам, рассчитана зависимость C_S от температуры для твердых благородных газов и галогенидов щелочных металлов. Для систем, в которых размер кристаллита мал, а вклад атомов поверхностных слоев относительно велик, нельзя пренебрегать влиянием поверхностных эффектов на физико-химические свойства системы. В связи с этим целью настоящей работы являлось оценка вклада удельной поверхностной теплоемкости в суммарную удельную теплоемкость нанокристаллического материала. При этом использован стандартный подход к квантово-механическому расчету молярной теплоемкости кристаллических веществ [4]. Если предполагать, что все атомы кристалла представляют собой систему гармонических осцилляторов, то можно применить функцию Планка для средней энергии линейного осциллятора для расчета колебаний атомов в кристаллической решетке. Колебательное движение атома раскладывается на три перпендикулярные составляющие, которые соответствуют трем линейным осцилляторам. Таким образом, число колебаний, приходящихся на один моль, составляет $3N_A$. Частота определяется главным образом силами, действующими между атомами. Если представить, что в одном моле кристалла содержится N_A атомов, из которых N^o – число атомов расположенных в объеме кристалла, а N^n – число атомов в поверхностных слоях кристалла, тогда в одном пространственном направлении имеется $N^o + N^n = N_A$ осцилляторов, причем

$$n_0^o \text{ атомов обладает энергией } \varepsilon_0^o = 1/2 h\nu^o$$

$$n_1^o \text{ атомов обладает энергией } \varepsilon_1^o = (1+1/2)h\nu^o$$

.....

$$n_i^o \text{ атомов энергией } \varepsilon_i^o = (i+1/2)h\nu^o,$$

где n_i^o количество осцилляторов, находящихся в объеме кристаллической решетки, обладающих соответствующей энергией.

Аналогично, для атомов, находящихся в поверхностных слоях кристаллической структуры, получим:

$$n_0^n \text{ атомов обладает энергией } \varepsilon_0^n = 1/2 h\nu^n$$

$$n_1^n \text{ атомов обладает энергией } \varepsilon_1^n = (1+1/2)h\nu^n$$

.....

$$n_i^n \text{ атомов энергией } \varepsilon_i^n = (i+1/2)h\nu^n.$$

Кроме того, имеем $N^o = \sum_i n_i^o$ и $N^n = \sum_i n_i^n$. Распределение отдельных атомов по энергетическим состояниям задает статистика Больцмана, тогда число атомов n_i , которое приходится на i -тое квантовое состояние и энергия колебаний которых равна $\varepsilon_i = (i+1/2)h\nu$ при температуре T , и $n_i^o = a^o e^{\frac{\varepsilon_i^o}{kT}}$, а $n_i^n = a^n e^{\frac{\varepsilon_i^n}{kT}}$, где k – постоянная Больцмана,

$$a^n = N^n e^{\frac{h\nu^n}{2kT}} \left(1 - e^{-\frac{h\nu^n}{kT}} \right), \quad a^o = N^o e^{\frac{h\nu^o}{2kT}} \left(1 - e^{-\frac{h\nu^o}{kT}} \right).$$

На основании изложенного общая энергия колебаний в одном пространственном направлении равна:

в поверхностных слоях $U^n = \sum_i n_i^n (i+1/2)h\nu^n$, в объеме кристалла $U^o = \sum_i n_i^o (i+1/2)h\nu^o$.

Учитывая значение констант, получим: $U^n = N^n \left(\frac{h\nu^n}{2} + \frac{h\nu^n}{e^{kT} - 1} \right)$ и $U^o = N^o \left(\frac{h\nu^o}{2} + \frac{h\nu^o}{e^{kT} - 1} \right)$.

Так как каждый атом решетки может независимо колебаться в трех пространственных направлениях, общая энергия атома будет равна утроенной энергии осциллятора. Тогда для общей энергии решетки ($U_{общ}$) получаем:

$$U_{общ} = 3N^n \left(\frac{h\nu^n}{2} + \frac{h\nu^n}{e^{kT} - 1} \right) + 3N^o \left(\frac{h\nu^o}{2} + \frac{h\nu^o}{e^{kT} - 1} \right).$$

Выразим N_n и N_o через $N_{общ}$. В кубическом приближении $N_{общ} = \left(\frac{R}{a} + 1 \right)^3$, где R – длина ребра кубической частицы (размер частицы), a – параметр кристаллической решетки. Тогда, рассматривая поверхность кубического кристалла как квадратную двумерную сетку, в узлах которой располагаются атомы поверхности N_n , доля этих атомов выразится как $\frac{N_n}{N_{общ}} = \frac{6\frac{R}{a}}{\left(\frac{R}{a} + 1\right)^2}$

и, соответственно, доля атомов объема выразится как $\frac{N_o}{N_{общ}} = 1 - \frac{6\frac{R}{a}}{\left(\frac{R}{a} + 1\right)^2}$. Учитывая эти соотношения, для общей внутренней энергии кристаллической решетки получаем:

$$U_{общ} = 3N_{общ} \left[\left(\frac{6\frac{R}{a}}{\left(\frac{R}{a} + 1\right)^2} \right) \left(\frac{h\nu^n}{2} + \frac{h\nu^n}{e^{kT} - 1} \right) + \left(1 - \frac{6\frac{R}{a}}{\left(\frac{R}{a} + 1\right)^2} \right) \left(\frac{h\nu^o}{2} + \frac{h\nu^o}{e^{kT} - 1} \right) \right].$$

С учетом вклада поверхностных атомов, для молярной теплоемкости кристаллического вещества получаем:

$$C_V = \left(\frac{\partial U_{общ}}{\partial T} \right)_V = 3R \left[\left(1 - \frac{6\frac{R}{a}}{\left(1 + \frac{R}{a}\right)^2} \right) \left(\frac{h\nu^o}{kT} \right)^2 \frac{e^{\frac{h\nu^o}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu^o}{kT}} - 1 \right)^2} + \frac{6\frac{R}{a}}{\left(1 + \frac{R}{a}\right)^2} \left(\frac{h\nu^n}{kT} \right)^2 \frac{e^{\frac{h\nu^n}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu^n}{kT}} - 1 \right)^2} \right]$$

Полученное выражение описывает зависимость удельной теплоемкости кристаллического вещества с учетом его дисперсности, причем ее изменения могут происходить при изменении размеров кристаллитов, в зависимости от вкладов атомов объема и атомов поверхностных слоев. Следует ожидать возможного изменения удельной теплоемкости поликристаллических нанодисперсных материалов по сравнению с монокристаллическими (массивными образцами). Причем, как показывает анализ полученного выражения, такое изменение может быть значительным только при размере кристаллита порядка 100 нанометров и менее. Такое изменение может сказываться на термодинамических особенностях нанодисперсных поликристаллических систем.

Таким образом, проведенные оценки показывают необходимость введения для описания нанодисперсных систем такого параметра состояния как дисперсность материала и позволяют говорить о возможности изменения основных термодинамических характеристик поликристаллических нанодисперсных материалов по сравнению с монокристаллическими - массивными образцами.

Список публикаций:

- [1] J. Lenard-Jones, *Expansion of lattice in the surface layers of the crystal*, *Proc. Roy. Soc. A107*, 157, 1925
 [2] Г.А. Гольдер, *Энергия и устойчивость кристаллических решеток*, диссертация, МАТИ, М, 1946
 [3] D.J. Naugle, R.E. Allen, *Simple model for surface specific heats*, *J.Chem.Phys.* 1975, 63, №2, 991-995
 [4] К. Мейер, *Физико-химическая кристаллография*, М., «Металлургия», 1972, 480 с.

Селекция изотопов в условиях формирования границы раздела фаз

Сачков Виктор Иванович

Томский политехнический университет

vicsachkov@mail2000.ru

Исследования в области физико-химических методов разделения изотопов показали значительную эффективность данных методов применительно к изотопам легких элементов. Основные физико-химические способы разделения изотопов разрабатывались и применяются для разделения изотопов легких элементов. Это методы фракционной перегонки, химический обмен, термодиффузионный метод, электролиз, сорбция, ионная миграция, и их многочисленные комбинации [1]. Рассмотрены проявления изотопических эффектов в процессах сольватации и их взаимосвязь с природой растворителя, а также на примерах рассмотрены термодинамические и кинетические аспекты процессов селекции изотопов в условиях формирования границы раздела фаз. Применение методов статистической термодинамики позволило рассчитать некоторые термодинамические параметры возможных процессов селекции изотопов в условиях формирования границы раздела фаз.

Если рассматривать процесс равновесной перекристаллизации, например, хлорида лития из его водного раствора, тогда его схему можно представить в следующем виде: $Li^6Cl_{(p-p)} + Li^7Cl \cdot H_2O_{(T)} \leftrightarrow Li^7Cl_{(p-p)} + Li^6Cl \cdot H_2O_{(T)}$, где в момент формирования границы раздела фаз (зарождения кристаллической фазы), система находится в состоянии, близком к состоянию истинного термодинамического равновесия [2].

Для такой системы из определения константы равновесия можно записать следующее выражение: $K_r = \frac{a_{Li^7Cl} \cdot a_{Li^6Cl \cdot H_2O}}{a_{Li^6Cl} \cdot a_{Li^7Cl \cdot H_2O}}$, согласно закону Рауля и, допуская, что

$\frac{P_{Li^6Cl}^0}{P_{Li^7Cl}^0} \approx 1, u \frac{P_{Li^7Cl \cdot H_2O}^0}{P_{Li^6Cl \cdot H_2O}^0} \approx 1$ можно полагать, что $K_r = K_p$. Применение статистической

термодинамики позволяет в данном случае оценить величину константы равновесия в данной системе следующим образом:

$$K_p = \frac{Z_{Li^7Cl} Z_{Li^6Cl \cdot H_2O}}{Z_{Li^6Cl} Z_{Li^7Cl \cdot H_2O}} = \frac{S_{Li^6Cl} S_{Li^7Cl \cdot H_2O}}{S_{Li^7Cl} S_{Li^6Cl \cdot H_2O}} \cdot \frac{v_{Li^7Cl} v_{Li^6Cl \cdot H_2O}}{v_{Li^6Cl} v_{Li^7Cl \cdot H_2O}} \exp \left(- \frac{v_{Li^7Cl} + v_{Li^6Cl \cdot H_2O} - v_{Li^6Cl} - v_{Li^7Cl \cdot H_2O}}{2T} \right) F(v)$$

подставив значение констант, имеем: $K_p = 1.08451e^{-\frac{9.975}{T}} = 1.04821$; а $\Delta G = -114.696$ Дж.

Таким образом, процесс должен протекать самопроизвольно в сторону накопления Li^6 в кристаллизуемой твердой фазе. Аналогичные термодинамические оценки проведены для процесса селекции изотопов водорода (протий и дейтерий) в данной же системе: $H_2O_{(p-p)} + LiCl \cdot D_2O_{(T)} \leftrightarrow D_2O_{(p-p)} + LiCl \cdot H_2O_{(T)}$. Получены следующие результаты: $K_p=2,969$; $\Delta G= -2,7$ кДж. В соответствии с термодинамическими оценками были проведены экспериментальные исследования селекции изотопов лития. Для этого проводили равновесную кристаллизацию раствора хлорида лития из его водных растворов при постоянном перемешивании до достижения состояния равновесного перераспределения изотопических компонентов по фазам. Полученные экспериментальные данные представлены в таблице 1. Результаты хорошо согласуются с проведенными теоретическими оценками.

Таблица 1 Термодинамические характеристики процессов

№	Растворитель	Т, К	ΔG , кДж		K_p	
			Эксп.	Расчетн	Эксп.	Расчетн
1	H ₂ O	298	- 154,687	- 114,696	1,0650	1,0482
2	D ₂ O	298	- 157,983	- 135,702	1,0665	1,0563
3	HDO	298	-	-	1,0595	-

Известно, что для различных изотопов, преимущественно легких элементов, наблюдаются различия теплот сольватации [3]. Данное отличие использовалось рядом исследователей при попытках селекции

изотопов в растворах [4], однако, ввиду незначительных отличий, как правило, не превышающих нескольких процентов, эффективность таких методов достаточно мала. Однако, если процесс протекает в условиях формирования фазового перехода, когда энергия фазового перехода сопоставима с величиной разницы теплот сольватации ионов, такой фактор может играть определяющую роль. Так, например, при кристаллизации хлорида лития из его водных растворов с малой добавкой ацетонитрила, наблюдается значительное изменение в процессе, вплоть до изменения его направления. На основании полученных экспериментальных данных рассчитаны термодинамические параметры процессов, представленные в таблице 2.

Проведенные исследования позволяют говорить об эффективности селекции изотопов в условиях формирования границы раздела фаз, где влияние незначительных различий в

Таблица 2 Термодинамические характеристики процессов

№	Растворитель	[CH ₃ CN], мол. %	Т, К	ΔG , кДж	K_p
1	H ₂ O	6,7	298	-82,987	1,0344
2	D ₂ O	6,7	298	710,420	0,7485

физико-химических свойствах изотопических молекул проявляется наиболее ярко за счет того, что величина различий сопоставима с термодинамическими величинами, характеризующими процессы фазовых переходов. Однако следует отметить, что в случае повышения температуры проведения процесса, эффективность такого разделения значительным образом падает и, при некоторой температуре, проведение процесса является нецелесообразным.

Список публикаций:

- [1] Андреев Б.М., Зельвенский Я.Д., Катальников С.Г., *Разделение стабильных изотопов физико-химическими методами*, М., Энергоатомиздат, с. 208, 1982
 [2] Ньют Я. *Кристаллизация из растворов*, М., Химия, 1974, 150 с.
 [3] Конференция «Химия и химическая технология на рубеже тысячелетий», т.2, с.158-160, Томск, 2002 г.
 [4] Королев В.П., Колкер А.М., Крестов Г.А., *Изв. Вузов, Химия и хим. технология*, 1977, т.20, №17, с.997-1001

Исследование релаксации внутренних напряжений в композиционных материалах методом ЯКР при неизотропном воздействии

Сеник Кирилл Александрович

Пермский Государственный Университет

Ажеганов Александр Сергеевич, к.ф.-м.н

senik@psu.ru

Объектом исследования являются композиты с зернистым наполнителем на основе стеклюющихся эпоксидных смол. При отверждении композиционного материала в системе полимерная матрица-наполнитель возникают внутренние напряжения. Спектр времен релаксации этих напряжений широкий ввиду различия в подвижности кинетических единиц полимерной матрицы.

Для исследования процессов релаксации внутренних напряжений использован метод ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР). Применение этого метода позволяет исследовать процессы с временами от 100 до 10^8 с. Частота ЯКР ν обладает высокой чувствительностью к изменению внешних условий (T - температуры и P - давления), при которых находятся кристаллы, содержащие квадрупольные ядра:

$$\nu(P_i) = \nu_0(P_i = 0, T_0) + (\partial\nu/\partial P)_T P_i + (\partial\nu/\partial T)_P (T - T_0) \quad (1)$$

Это дает возможность использовать порошок кристаллического наполнителя в качестве датчика состояния полимерной матрицы.

Экспериментально исследованы образцы эпоксидных смол ЭД-20, отвержденных ПЭПА при 413 К. В качестве наполнителя был введен порошок закиси меди Cu_2O . Спектр ЯКР кристаллов Cu_2O состоит из двух широко разнесенных линий изотопов ^{63}Cu и ^{65}Cu . Частота ЯКР ядер ^{63}Cu в кристаллах Cu_2O при $T = 293$ К и отсутствии давления $\nu(P_i=0) = 26015$ кГц, барический коэффициент частоты $(\partial\nu/\partial P)_T = 369$ Гц/МПа

Исследовались релаксационные процессы вблизи температуры стеклования, вызванные одноосной деформацией образцов. Для этого сначала была найдена зависимость сдвига частоты ЯКР $\Delta\nu_e$ от внешнего одноосного давления на образец P_e . Цилиндрический образец помещался в термостатированную камеру между пуансонами. На пуансоны ступенчато накладывалась нагрузка от 0 до 10 МН, создающая осевое давление в образце до 20 МПа. Деформация матрицы приводит к увеличению давления на частички наполнителя и, следовательно, к дополнительному сдвигу частоты ЯКР $\Delta\nu_e$. Наблюдаемое значение дополнительного сдвига частоты $\Delta\nu_e$ оказалось значительно меньше сдвига $\Delta\nu_f$, который соответствовал бы всестороннему сжатию образца тем же давлением. Это свидетельствует о том, что основную нагрузку в композите с зернистым наполнителем несет матрица.

Была создана модель для описания зависимости сдвига частоты сигнала ЯКР $\Delta\nu_e$ от концентрации наполнителя c и упругих модулей материала матрицы (E -модуля Юнга, μ - модуля сдвига) при одноосном нагружении:

$$\frac{\partial\Delta\nu_e}{\partial P_e} = \frac{1}{3(1+c-c^{1/3}+\gamma c^{2/3})} \frac{\partial\nu}{\partial P} \quad (2)$$

где $\gamma = \mu/E$ отношение модуля сдвига и модуля Юнга эпоксидной матрицы, $(\partial\nu/\partial P)$ - барический коэффициент частоты ЯКР квадрупольных ядер наполнителя.

На рис.1 показана теоретическая зависимость (2) и экспериментальные данные для смолы ЭД-20 (отношение модуля сдвига и модуля Юнга $\gamma = 0,33$).

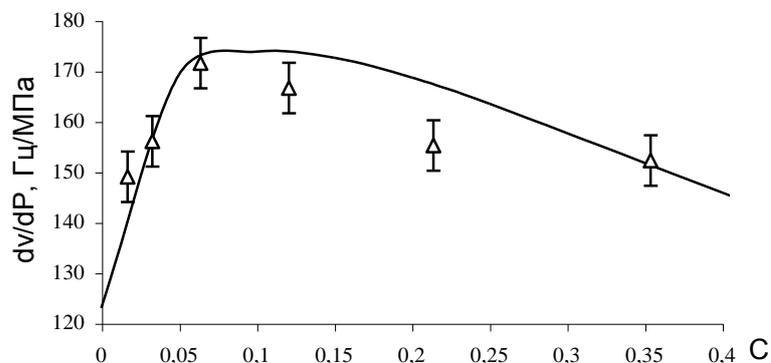


рис.1.

Получены экспериментальные данные о временах релаксации напряжений при одноосной деформации вблизи температуры стеклования в отвержденных эпоксидных смолах. Образцы с концентрацией наполнителя $c = 0,12$ и $c = 0,21$ объемных долей помещались в термостатированную камеру, нагретую до температуры, близкой к температуре стеклования T_g . Перемещением пуансона создавалась фиксированная по величине деформация цилиндрического образца вдоль его оси. Начальная величина давления пуансона оценивалась по сдвигу частоты ЯКР наполнителя и составляла около 24 МПа. Процесс релаксации созданных напряжений наблюдался по изменению сдвига частоты ЯКР $\Delta \nu_e$.

Процесс релаксации имел явный двухэкспоненциальный характер. Характерные времена “медленной” релаксации τ_α и “быстрой” релаксации τ_β отличаются на один порядок вблизи температуры стеклования.

Установлены значения эффективных энергий активации молекулярных движений и их зависимость от температуры.

В интервале температур стеклования наблюдается резкий рост времен релаксации, что свидетельствует о росте степени кооперативности молекулярных движений при переходе смолы в стеклообразное состояние

Развитие метода ЯКР на основе использования кристаллических наполнителей, содержащих квадрупольные ядра, позволяет получать новую информацию об особенностях процессов межкомпонентного взаимодействия твердых композитов при неизотропных воздействиях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (код проекта 02-01-96413) и средств гранта PE-009-0 Американского Фонда Гражданских Исследований и Развития (АФГИР).

Характер закона Вегарда и сверхструктурная фаза в эпитаксиальных гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (100).

Середин Павел Владимирович

Воронежский государственный университет

Домашевская Эвелина Павловна д.ф.-м.н

paul@ftt.vsu.ru

Работа посвящена исследованию характера изменений периодов кристаллической решетки в эпитаксиальных гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}(100)$ с различными значениями x , полученных методом МОС-гидридной эпитаксии.

Для анализа были представлены образцы, представляющие собой гетероструктуры, в которых на монокристаллических подложках GaAs (100) выращены эпитаксиальные монокристаллические пленки $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ методом МОС - гидридной эпитаксии, путем разложения металлоорганических соединений, изготовленные в Физико-техническом институте имени А.Ф. Иоффе. Величина x - это доля атомов алюминия, замещающих атомы галлия. Технологические данные, относительно содержания Al в твердых растворах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ следующие: EM28 – 0.121, EM29 – 0.16, EM49 – 0.54, EM72 – 1, EM77 > 0.8, EM135 – 0.5.

Ввиду достаточно большой толщины пленок $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ (~1мкм) при определении их межплоскостных расстояний и параметров оказалось возможным использовать методы рентгеноструктурного анализа: дифрактометрический и рентгенографическим метод обратной съемки от плоского образца.

Результаты работы:

1. Дифракционным и рентгенографическим методами определены периоды решеток эпитаксиальных твердых растворов тройной системы $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, с различной концентрацией алюминия x в эпитаксиальных гетероструктурах, выращенных на монокристаллических подложках $\text{GaAs}(100)$.

2. При малых концентрациях Al постоянная решетки твердого раствора соответствует линейной зависимости величины параметра решетки от концентрации взаимозамещающихся атомов в металлической подрешетке сфалеритной системы AlAs-GaAs [1] (см. рис.1).

3. Для составов пленок с содержанием алюминия $\geq 50\%$ в металлической подрешетке параметры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ существенно отличаются от значений, рассчитанных в соответствии с линейным законом Вегарда [1] (см. рис.1). Полученный результат согласуется с данными некоторых литературных источников [2].

4. В эпитаксиальных гетероструктурах $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ (100) с $x \sim 0.5$, обнаружена сверхструктурная фаза, являющаяся химическим соединением AlGaAs_2 с параметром $c=11.292$ Å.

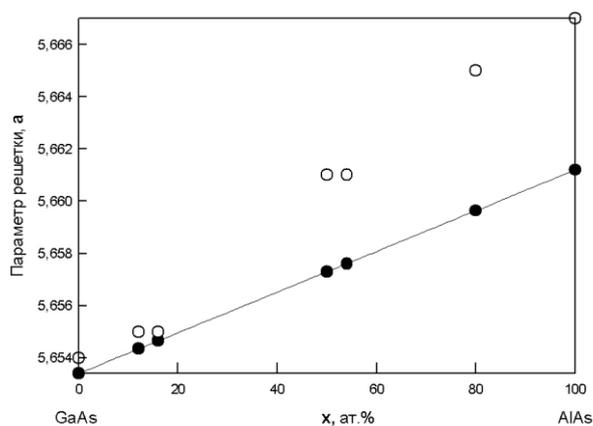


рис.1

Список публикаций:

- [1] Сайт РФТИ им. Иоффе С-Пб. Характеристики новых полупроводниковых материалов. www.ioffe.ru
- [2] Deviation of the AlGaAs lattice constant from Vegard's law. D Zhou and B.F. Usher. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 34 (2001) 1461-1465.

Метод упрощения расчета электронной структуры нанотрубок

Сорокин Павел Борисович

Красноярский государственный университет

Фёдоров Александр Семёнович, к.ф.-м.н

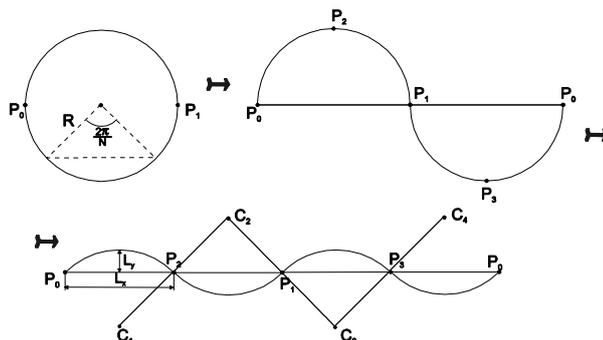
PSorokin@iph.krasn.ru

Экспериментальное открытие в 1991 [1] углеродных нанотрубок открыло совершенно новые возможности, как в прикладной, так и фундаментальной физике. Углеродные нанотрубки благодаря своим размерам (поперечный размер порядка нанометра) и одномерности структуры, обладают уникальными механическими, химическими, и электрическими свойствами, которые уже сейчас применяются во многих технических направлениях. Также, особые упругие свойства и электропроводность углеродных нанотрубок используются в туннельной и атомно-силовой микроскопии. Естественно, любому техническому применению должно предшествовать подробное теоретическое исследование. Поэтому представляется чрезвычайно важным проведение теоретических исследований электрических и механических свойств нанотрубок, образования дефектов, их функционализации, т.е. образование химических связей с внешними молекулами. К сожалению, теоретическое квантовохимическое исследование однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ) является достаточно трудоемкой задачей, главным образом из-за времени счета ОУНТ больших диаметров, наиболее часто встречающихся в экспериментах. Элементарная ячейка таких ОУНТ обычно содержит от 10^1 до 10^2 атомов, но при исследовании влияния дефектов (адсорбируемые молекулы, вакансии) на свойства ОУНТ необходимо рассматривать несколько элементарных ячеек расположенных на оси ОУНТ на расстоянии ~ 10 Å. Т.о., исследование дефектов любого вида внутри ОУНТ требует рассмотрения структуры содержащих уже на порядок больше атомов ($\sim 10^2$ - 10^3). На сегодняшний момент расчет

электронной структуры подобных структур является чрезвычайно трудоёмкой задачей для любого из квантово-химических методов расчета, расчетная время которых варьируется от $\sim N^2$ до N^4 . Т.о., обобщая вышесказанное, можно предположить, что в исследованиях, связанных с ОУНТ больших диаметров, модификация элементарной ячейки с уменьшением размера ячейки и числа атомов в ней будет очень важна, если она не будет создавать существенной погрешности в расчетах.

В данной работе предложена методика, позволяющая значительно сократить время расчета электронной структуры ОУНТ. Данное приближение, имеющее в основе изменение геометрии ОУНТ, позволяет значительно уменьшить размер элементарной ячейки ОУНТ, а также количественно атомов в ней.

Основная идея методики базируется на том, что электронная структура ОУНТ и графитовой плоскости имеют схожие черты. Только в случае ОУНТ самых малых диаметров электронные структуры графита и ОУНТ начинают несколько различаться. Исходя из сравнения геометрических структур графита и ОУНТ, можно видеть, что основное различие между ними – в граничных условиях. Графитовая плоскость обычно рассматривается, как бесконечно протяженная, в то время как ОУНТ может быть рассмотрена подобным образом лишь в направлении оси трубки. Периодические граничные условия, обусловленные периодичностью при обходе вдоль окружности нанотрубки, позволили предположить возможность изменения геометрии рассчитываемой структуры путем искусственного разделения структуры нанотрубки на сектора и введения дополнительных граничных условий для каждого сектора. На рисунке показана последовательная трансформация ОУНТ в гофрированную поверхность (ГП), состоящую из двух и, далее, из четырех секторов, обладающих той же кривизной, что и первоначальная структура.



Тот факт, что ОУНТ разбивается на некоторое количество периодически повторяемых секций, расположенных вдоль оси X, позволяет произвести расчет электронной структуры только для одной секции ГП. Необходимо отметить, что число атомов в элементарной ячейке ГП есть число атомов элементарной ячейки деленное на число эквивалентных секции ГП.

Исходя из вышесказанного, можно предположить, что время счета будет значительно уменьшаться вместе со степенью деления ОУНТ. Однако, очевидно, что чем меньше данная геометрическая структура ГП будет напоминать геометрию ОУНТ, тем больше будет различие в результатах расчета трубки и ГП.

Для проверки предложенной теории были рассчитаны электронные структуры ОУНТ типа (8,8), (16,16), (20,0) (обозначения Уайта и др. [2]) и соответствующих им ГП.

Все приведенные расчеты были получены с помощью программы VASP 4.4.3 (Vienna Ab-initio Simulation Package). VASP - это пакет для квантово-механического моделирования (включая возможность проведения МД расчетов) из первых принципов (ab-initio) с использованием псевдопотенциалов Вандербиля, формализма функционала плотности и базиса плоских волн.

Также было проведено исследование упругих свойства ОУНТ и соответствующих им ГП, которое показало, что при небольших деформациях сохраняется приемлемая точность расчета

Предложенный метод может быть применен не только для углеродных, но и для неуглеродных нанотрубок. Для подтверждения этого факта были рассчитаны бор-нитридные нанотрубки (10,10), (12,12), (14,14), (16,16) и другие неуглеродные нанотрубки.

Расчеты показали, что данная методика позволяет рассчитывать такие величины как энергия связи, модуль упругости, плотность электронных состояний и др., в хорошем согласии с другими методиками при значительном сокращении времени расчета.

Список публикаций:

[1] S.Ijima, *Nature* **354**, 56 (1991).

[2] C.T.White et al. *Phys. Rev.* **B47**, 5485 (1993).

Кристаллизация аморфной фазы, полученной термоэлектрическим воздействием на поверхности LiF

Стерелюхин Андрей Александрович

Карьев Леонид Геннадиевич

Тамбовский Государственный Университет им. Г.Р. Державина

Федоров Виктор Александрович, д.ф.-м.н

feodorov@tsu.tmb.ru

В работе [1] было показано, что одновременное воздействие нагрева и постоянного электрического поля на щелочно-галогидные кристаллы приводит к структурным изменениям поверхности {100}, состоящим в появлении «капель» вязкой жидкости. При длительном вылеживании при комнатной температуре вещество новообразований кристаллизуется.

Данная работа посвящена исследованию морфологии структурных изменений поверхностей $\{0\bar{3}5\}$, {110} и {111} кристаллов LiF под действием нагрева и электрического поля и их последующей кристаллизации. Образец размером 20-8-(2÷3) мм вытачивали из крупного блока, а затем полировали и помещали между двумя никромовыми электродами, при этом он надежно контактировал с одним из них, а между противоположной гранью и вторым электродом создавался зазор ~ 0,1 мм. К электродам прикладывалось постоянное электрическое напряжение 400 В. Поле ориентировалось нормально исследуемой поверхности кристалла. Скорость нагрева в печи составляла 200 К/ч.

Зависимость плотности тока в цепи носит экспоненциальный характер. Во всех опытах при температурах больше 500 К на противоположной плотно контактирующему электроду и перпендикулярных ей боковых поверхностях образцов появлялись изменения в виде желеобразных новообразований неопределенной формы характерным размером 3-300 мкм. В отсутствие поля при нагреве до предплавильных температур изменений этого типа не наблюдается.

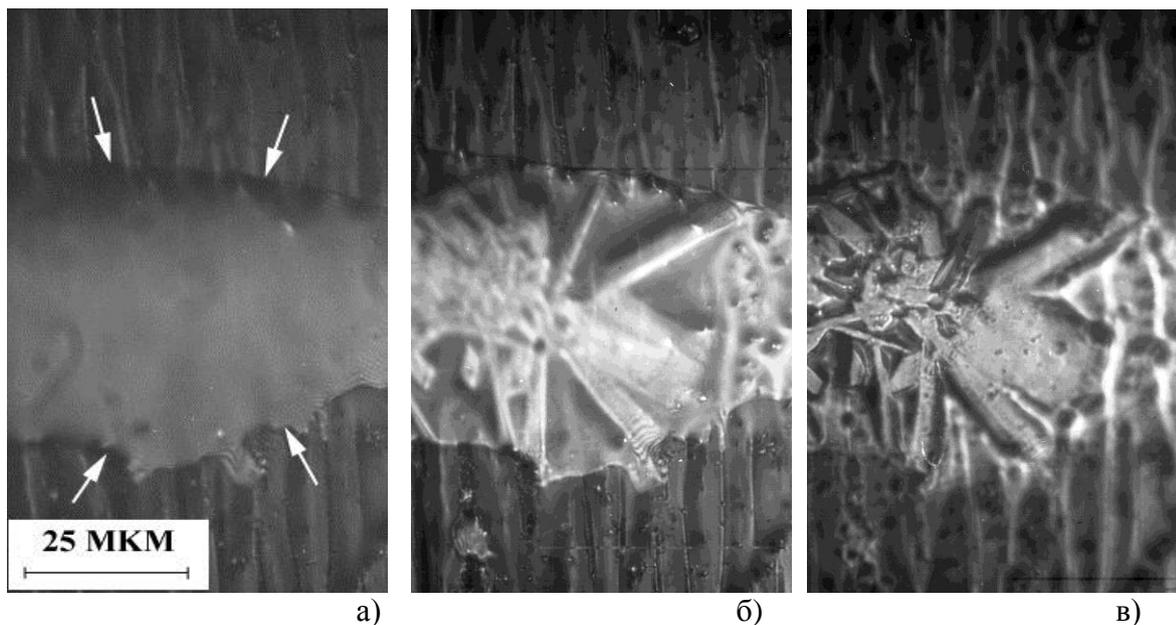


рис.1. Рост кристаллов в аморфно кристаллической фазе на свободной поверхности $\{110\}$. Материал – LiF; поверхность заряжена отрицательно; а) первоначальное состояние участка аморфно-кристаллической фазы (стрелками обозначены края участка), б) тот же участок через 2 минуты - рост кристаллов, в) тот же участок через 5 минут – процесс кристаллизации завершен.

Под воздействием излучения видимого диапазона в желеобразном веществе происходит кристаллизация (рис. 1) со скоростью достигающей 0,1-3 мкм/с в зависимости от формы роста кристалла. Кристаллизация происходит послойно и образующиеся кристаллы наиболее часто растут в форме игл, так как скорость роста в длину значительно превышает скорость роста в ширину и кристаллы имеют огранку.

Появление новообразований связано с перемещением собственных точечных дефектов в температурном интервале ионной проводимости, которое вызывает накопление в поверхностных слоях избыточного заряда и изменение стехиометрического состава, в результате чего меняется температура плавления. При понижении температуры аморфно-кристаллический слой силами поверхностного натяжения разрывается на отдельные участки вязкой жидкости, в которых концентрируется заряд.

Рост кристаллов в аморфно-кристаллической фазе на свободной поверхности кристалла вызывается восстановлением стехиометрии при релаксации объемного заряда новообразований.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 02-01-01173)

Список публикаций:

[1] Meksichev O.A., Karyev L.G., Fedorov V.A., Sterelukhin A.A. Generation of the Amorphous - crystalline Phase on Surface of Alkali-halide Crystals by Thermoelectric Effect // ICSC. 2003. Vol. 2. Pp. 503-510.

Эффекты пробоя р-п перехода в диодных и транзисторных структурах под воздействием сверхкоротких импульсов электромагнитного излучения

Таран Александр Григорьевич

Требунских Сергей Юрьевич

Воронежский Государственный Университет

Терехов Владимир Андреевич, д.ф-м.н

root@ftt.vsu.ru

Цель исследований заключается в выявлении характера воздействия сверхкороткого импульса электромагнитного излучения (СКИ ЭМИ) на параметры транзисторных и диодных структур. В результате экспериментов получили, что воздействие СКИ ЭМИ приводит к уменьшению коэффициента статического усиления h_{21E} и к увеличению обратных токов как в транзисторных так и в диодных структурах. СКИ ЭМИ представляет собой биполярный импульс длительностью 5 нс и перепадом амплитуды 1,5 кВ. Длительность фронтов 0,5-0,8 нс. Общая энергия импульса составляет $(3,0 \pm 0,01) \cdot 10^{-5}$ Дж.

Установка представляет собой экранированную трубу (увеличенный коаксиал с внутренним и внешним радиусом). С одной стороны подключается генератор. Труба имеет на всей длине окна для помещения в них тестовых структур. Тестовые структуры помещаются в окна с помощью держателя, у которого имеются выводы для подключения тестирующих приборов. Между окнами в коаксиальной нагрузке находится поглотитель для изменения энергии сигнала.

Эксперимент проводился по следующей схеме:

1. В первое окно помещалась тестовая структура;
2. Измерялись параметры структуры до воздействия;
3. Измерялись параметры структуры под воздействием;
4. Измерялись параметры структуры после воздействия СКИ ЭМИ;
5. После этого тестовая структура помещалась в следующее окно и снова повторялись п.2, 3, 4.

Во время воздействия замечалось существенное изменение параметров, которое много больше чем погрешность измерения. Так, обратный ток коллектора биполярных транзисторов (I_{cbo}) при $U_{cbo}=10V$, увеличивался на 2-3 порядка в зависимости от энергии воздействующего сигнала СКИ ЭМИ, а статический коэффициент передачи тока (h_{21E}) уменьшался на 10-20%. При измерении обратного тока в диодах (I_R) при приложенном напряжении 1В ток увеличивается I_R до двух раз. Эти результаты говорят о пробое р-п перехода СКИ.

В результате рассмотрения различных транзисторов, получили следующее: изменение параметров при воздействии СКИ зависит от пробивного напряжения транзистора. Чем меньше пробивное напряжение транзистора, тем больше эффект воздействия и тем больше изменение обратного тока коллектора, а так же сильнее изменение коэффициента усиления. Также было замечено, что результат воздействия СКИ ЭМИ на порядок выше в транзисторах типа р-п-р, чем в транзисторах типа п-р-п. Так как после воздействия не наблюдается деградации параметров, т.е. параметры приходят к исходным значениям, то можно было исключить тепловой пробой. Можно предположить, что основным эффектом является лавинный пробой.

Электронное строение и химическая связь NaClO_3 .

Тарасов Виктор Алексеевич

Кемеровский Государственный Университет

Журавлев Юрий Николаевич, к.ф-м.н

apollo@ic.kemsu.ru

Хлорат натрия широко используется как сырье твердотопливных установок. NaClO_3 . Он имеет кубическую решетку с 4 формульными единицами в элементарной ячейке и пространственной группой симметрии T^4 . С постоянные решетки равны: $a=6.576 \text{ \AA}$, $b=6.576 \text{ \AA}$, $c=6.576 \text{ \AA}$. Характерные минимальные расстояния в кристалле: $\text{Na-O}=2.4187 \text{ \AA}$, $\text{Br-O}=1.4848 \text{ \AA}$, $\text{O-O}=2.3859 \text{ \AA}$. Расчет зонной структуры выполнен в [1].

Для рассмотрения химической связи между отдельными атомами обратимся к рис. 1, где изображены карты валентной и разностной электронной плотности. Разностная плотность определяется вычитанием из валентной кристаллической подрешеточных плотностей. В подрешетку входят атомы, связанные между собой элементами пространственной группы симметрии кристалла. В силу нормировки плотностей карты $\Delta\rho$ показывают области «натекания» и «вытекания» электронного заряда.

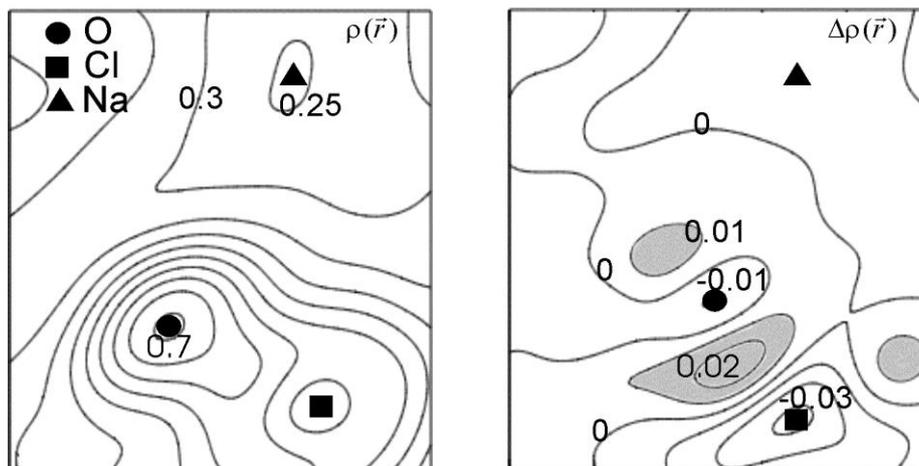


рис. 1. Валентная (слева) и разностная (справа) плотность хлората натрия.

На Рис. 1 приведена плоскость, проходящая через атомы натрия, хлора и кислорода. Значение плотностей дано в единицах $e \cdot \text{Å}^{-3}$, где e – заряд электрона. Из рисунка валентной плотности видно наличие общих контурных линий для атомов хлора и кислорода, что свидетельствует о ковалентной связи между этими атомами.

На карте разностной плотности видно, что при взаимодействии подрешеток хлора и кислорода происходит перераспределение заряда. Отрицательные значения разностной плотности приходятся на позиции атомов, а положительные – на линию связи Cl-O. Также положительные области находятся за атомом кислорода. Вблизи позиций натрия разностная плотность имеет отрицательное значение это свидетельствует о том, что электрон был отдан аниону, следовательно, связь натрия с анионом ионная.

Список публикаций:

[1] Тарасов В.А. Электронный спектр кристалла NaClO_3 . // Сборник тезисов Девятой Всероссийской научной конференции студентов-физиков и молодых ученых. – Екатеринбург-Красноярск, АСФ России, 2003. – Т. 1, С. 117-118.

Фазовый переход в двуокиси марганца
Тихонов Никита Дмитриевич
Петрозаводский Государственный Университет
Малиненко Владимир Понтелимонович, к.ф.-м.н
haos@onego.ru

Оксиды переходных металлов представляют класс веществ широко используемых в электронике. Интересным представителем этого класса веществ является диоксид марганца (ДМ). Термин ДМ применяется к соединениям, имеющим соотношение между марганцем и кислородом от 1.7 до 2.0. Под общим названием ДМ объединяется несколько модификаций. Различные модификации ДМ имеют одну особенность, благодаря которой просматривается общность структуры. Она заключается в том, что основой их строения является кислородный октаэдр, в центре которого помещен ион марганца. Характер связи между этими октаэдрами через вершины ребра или грани может меняться в зависимости от условий получения при сохранении формульного состава в различных модификациях. ДМ является антиферромагнитным полупроводником с температурой перехода из парамагнитного в антиферромагнитное состояние при $\sim 94^{\circ}\text{K}$

В работе исследовалась зависимость сопротивления ДМ от температуры. Исследуемый образец был получен пиролизом при температуре $350\text{-}400^{\circ}\text{C}$. На основании рентгеноструктурного анализа было показано, что данный образец состоит из β -фазы двуокиси марганца. Образец имел поликристаллическую структуру, поэтому использовался переменный сигнал для исключения влияния емкости, обусловленной потенциальным барьером на границе зерен. Охлаждение образца производилось в криорефрижераторе Гиффорда Мак-Магона в диапазоне температур от 23 до 291°K . Температурные зависимости удельного сопротивления $\rho = f(1/T)$ приведена на рисунке (рис.1).

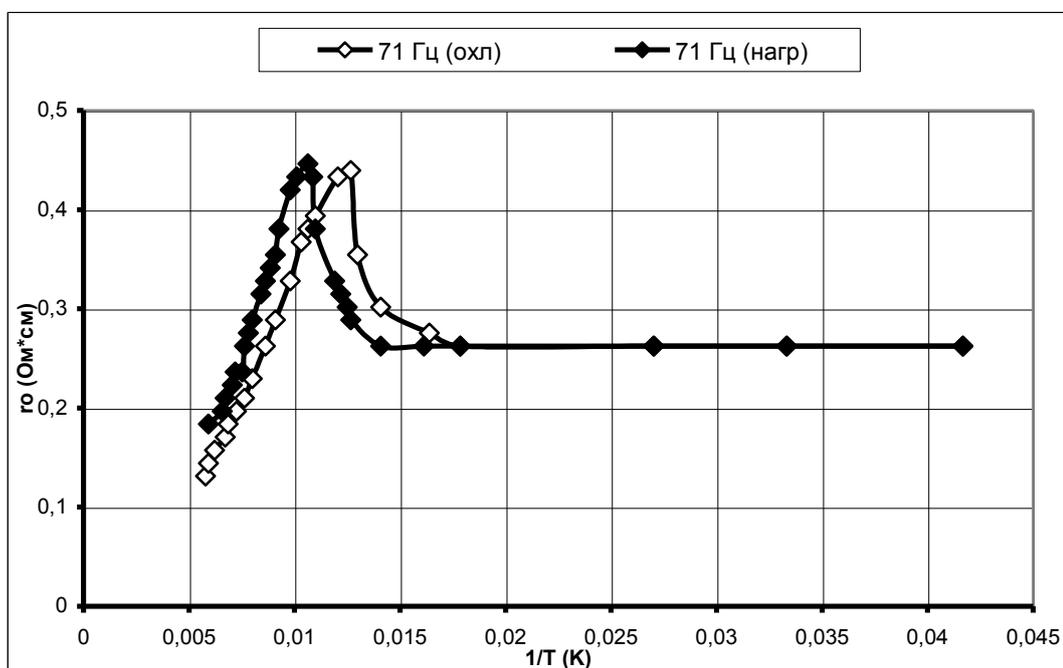


рис.1

На рисунке видны области соответствующие полупроводниковому и металлическому характеру поведения удельного сопротивления от температуры, т.е. образец переходит из полупроводниковой фазы в металлическую фазу при понижении температуры. Данный

фазовый переход можно отнести к «аномальным» моттовским переходам, т.к. переход из полупроводниковой фазы в металлическую фазу происходит при понижении температуры в то время, как Мотт рассматривал переход из полупроводниковой фазы в металлическую при повышении температуры.

Характер изменения проводимости с температурой соответствует поведению магнитных полупроводников. Температура максимума сопротивления 94 – 101 К при нагревании, что соответствует температуре антиферромагнитного перехода диоксида марганца. Наблюдаемый фазовый переход металл – полупроводник совпадает с переходом Нееля и обусловлен влиянием магнитных свойств на проводимость двуокиси марганца.

Влияние сверхкоротких импульсов электромагнитного излучения на характер переключения логических элементов

Требунских Сергей Юрьевич

Грошев Александр Анатольевич, Жихарев Дмитрий Сергеевич
Воронежский Государственный Университет

Терехов Владимир Андреевич, д.ф-м.н

root@ftt.vsu.ru

Современные достижения в области техники генерации электромагнитного излучения (ЭМИ) позволяют реализовать видеоимпульсы с большой пиковой мощностью с нано- и пикосекундной длительностью, соизмеримой с характеристическими временами отклика диэлектрических, полупроводниковых и металлических материалов, составляющих материальную базу современной радиоэлектронной аппаратуры.

Фундаментальные процессы нестационарного нелинейного преобразования энергии мощных сверхкоротких импульсов (СКИ) ЭМИ в энергию отклика полупроводниковых и диэлектрических материалов коренным образом отличаются по характеру от достаточно хорошо изученного взаимодействия этих материалов с гармоническим или импульсным ЭМИ большой длительности, когда переходные процессы несущественны.

Целью данной работы являлось изучение изменений в функционировании отечественных микросхем К 555лн1 и КР 1531лн1, под воздействием СКИ ЭМИ.

Исследуемые микросхемы представляют собой набор из шести логических элементов «НЕ», и изготовлены по стандартной технологии ТТЛШ. В ходе эксперимента данные микросхемы использовались как основной элемент в схеме симметричного мультивибратора, рабочие параметры которого задавались внешней R–C – цепью (частота следования импульсов – 500 Гц).

В качестве воздействующего излучения использовались биполярные СКИ ЭМИ, параметры которых представлены ниже:

- амплитуда сигнала – 1,25 кВ;
- длительность сигнала – 4 нс;
- длительность фронтов – 0,5 – 0,8 нс;
- частота следования сигнала – 100 кГц .

Эксперименты проводились с использованием согласованной широкополосной коаксиальной нагрузки (ШКН), позволяющей практически полностью исключить влияние СКИ на внешние измерительные приборы различного назначения. Конструктивно ШКН представляет собой волновод, состоящий из двух проводящих цилиндров, помещенных один в

другой и соединенных друг с другом посредством резистора (50 Ом) с одной стороны и разъемом СР–50 (для соединения с генератором наносекундных импульсов (ГНИ)) с другой. Во внешнем цилиндре вдоль всей его длины расположены отверстия, закрытые заглушками, которые исполняют роль позиционных окон для размещения тестовых структур. Полость между цилиндрами заполнена материалом, способным поглощать электромагнитное излучение (поглотителем), таким образом, чтобы при переходе от окна к окну энергия воздействующего излучения уменьшалась.

В ходе эксперимента было установлено, что с ростом энергии импульса воздействующего излучения частота следования сигналов мультивибратора на микросхеме КР 1531лн1 увеличивалась и, начиная с определенного значения энергии импульса ($\sim 10^{-6}$ Дж), становилась равной удвоенной частоте следования воздействующих импульсов. При дальнейшем увеличении энергии импульса воздействующего излучения частота следования сигнала мультивибратора уже не менялась. При проведении того же эксперимента с мультивибратором на микросхеме К 555лн1, частота следования его сигналов также увеличивалась с ростом энергии импульса воздействующего излучения, но в меньшей степени по сравнению с мультивибратором на КР 1531лн1. Кроме того, для мультивибратора на микросхеме К 555лн1 не наблюдалось такого состояния системы, при котором дальнейшее увеличение энергии импульса воздействующего излучения не приводило бы к изменению частоты следования сигнала мультивибратора.

Времена одночастичной релаксации в гетеросистеме $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$.

Устинов Алексей Михайлович

Горбунова Юлия Николаевна

Рязанский государственный педагогический университет им. С.А. Есенина

Кадушкин Владимир Иванович, д. ф.-м. н

Julik@rspu.ryazan.ru

В экспериментальных работах по исследованию особенностей поперечного магнитосопротивления $\rho_{xx}(B)$ Шубникова – де Газа (ШДГ) в широком диапазоне температур и магнитных полей для объемных 3D и двумерных 2D электронов были обнаружены некоторые аномалии, имеющие не только некоторую общность, но и существенные различия. Установлена определенная связь этих аномалий с сильным электрон-электронным (e-e) взаимодействием. Попытки количественного описания экспериментальных зависимостей $\tau_q(T, n_s)$ предпринята в работе [1].

Для выяснения вклада внутривибронной релаксации в затухание квантования Ландау осцилляций ШДГ сопоставим времена внутривибронной релаксации, рассчитанные теоретически, с экспериментальными данными.

Исследования были проведены на трех образцах гетероструктуры $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ ($x=0.3$) с заполнением одной подзоны размерного квантования в диапазоне температур от до К. Для различных температур были сняты зависимости $\rho_{xx}(B)$. По ним с помощью графического анализа (метод Сладека) были определены температуры Дингла T_D , связанные с временами одночастичной релаксации соотношением $T_D = \frac{\hbar}{2\pi k \tau_q}$. Результаты обработки эксперимента

для 3 структур представлены на рис. 1 а-с полыми кружками.

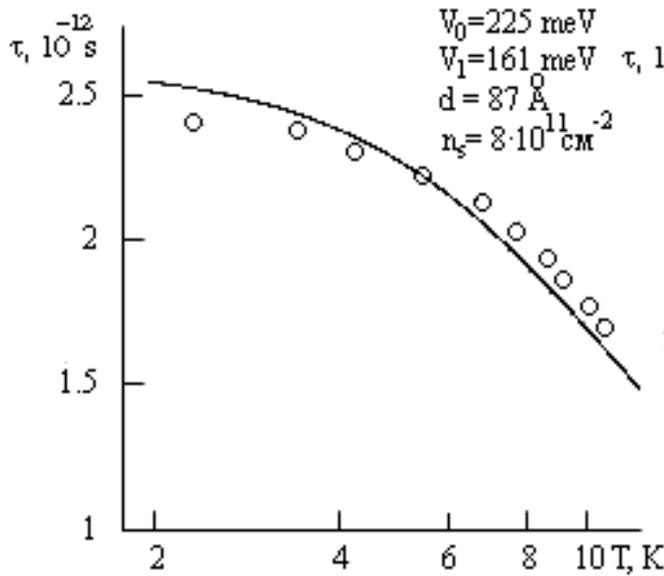


Рис. 1 а

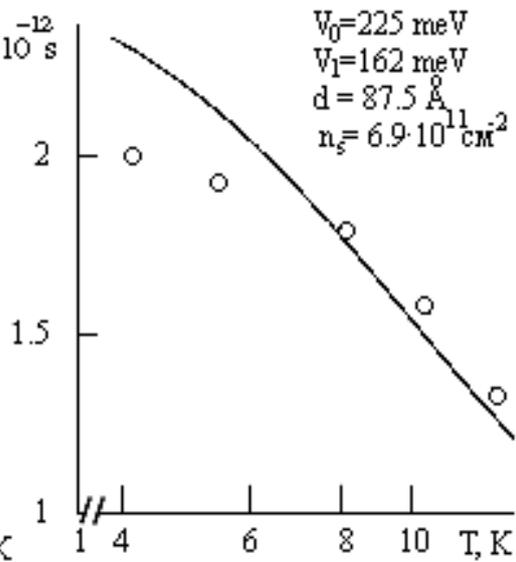


Рис. 1 б

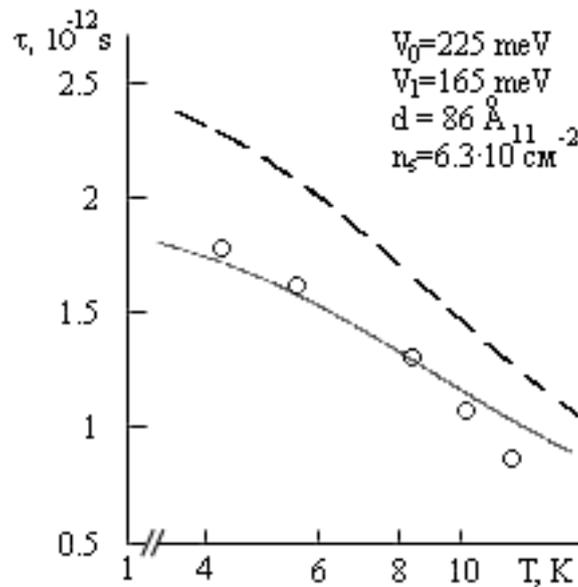


Рис. 1 с

Теоретические времена релаксации были рассчитаны на основе анализа по схеме работы [1]. Реальный профиль $E(z)$ зоны проводимости гетеропереходов аппроксимировался треугольной ямой, параметры ям для каждого из образцов представлены на рис. 1. Расчетные времена релаксации представлены на рис. 1 сплошными кривыми.

Из рис. 1 видно, что хорошее согласие экспериментальных и теоретических времен релаксации наблюдается только для 2-х образцов (рис. 1а, 1б). Для третьего образца расхождение данных эксперимента и теории велико (штриховая кривая на рис. 1с). Была предпринята попытка уменьшить это расхождение данных, варьируя параметры ямы в небольших пределах. Удалось добиться удовлетворительного согласия результатов (сплошная кривая рис. 1с).

Однако использование характеристик потенциальной ямы как подгоночных параметров является не вполне корректным.

Встает вопрос, чем может объясняться полученный результат. Возможно, что время одночастичной релаксации определяется не только е-е взаимодействием, но и каким-то другим механизмом взаимодействия. В качестве такого механизма взаимодействия может выступать электрон-фононная релаксация [2]. К уже полученным результатам в соответствии с правилом Матисенна необходимо прибавить времена релаксации на деформационных и пьезоэлектрических акустических фонах.

Это требует дополнительного исследования, которое будет предпринято в дальнейшем.

Список публикаций:

[1] V.I. Kadushkin, Yu.N. Gorbunova, A.B. Dubois, A.P. Melekhov and F.M. Tsahhaev, *Phys. Low-Dim. Struct.*, **11/12**, 27-38(2002). [2] В. Карпус. *ФТП*, **20**, 12(1986); **22**, 439(1988).

Особенности анализа биений осцилляций Шубникова- де Гааза

Устинов Алексей Михайлович

Горбунова Юлия Николаевна

Рязанский государственный педагогический университет им. С.А. Есенина

Кадушкин Владимир Иванович, д. ф.-м. н

julik@rspu.ryazan.ru

Эффекты квантования Ландау (осцилляции магнитной восприимчивости Ван Альфена – де Гааза, магнитосопротивления Шубникова – де Газа (ШдГ), ЭДС ФЭМ Кикоина – Носкова и др.) являются наиболее распространенным и информационным методом получения ценной информации об объектах исследования – гетероструктурах. Основными методами обработки осцилляций – графический метод Сладека, Фурье- анализ и метод, предложенный Аверкиевым и др. [1].

Однако осцилляции не всегда имеют удобный вид для обработки. В частности, трудности возникают, когда на осцилляциях возникают биения. Типичный вид осцилляций ШдГ с биениями представлен на рис. 1 [2].

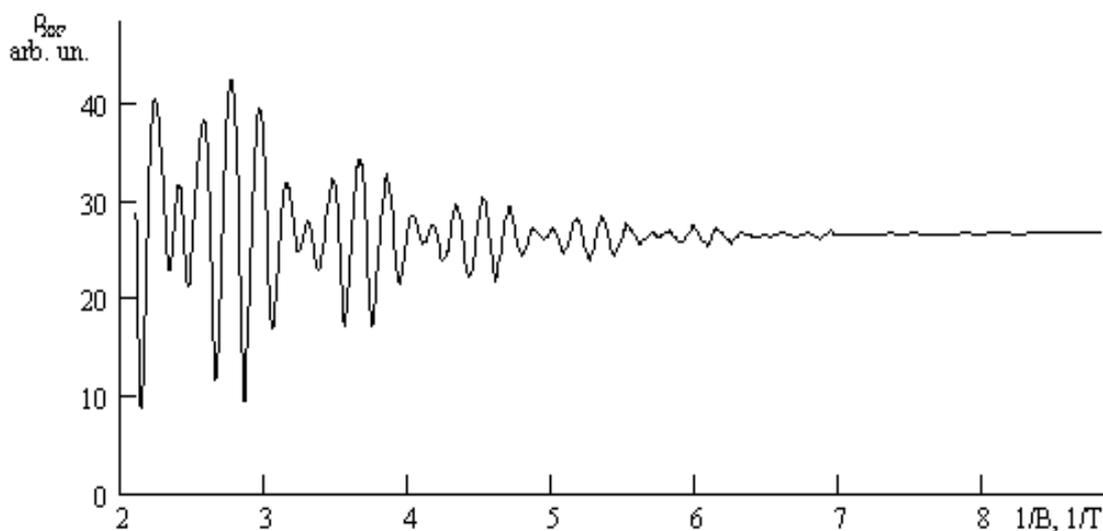


рис. 1

Традиционный подход метода Сладека не позволяет разделить гармоники и, следовательно, получить необходимую информацию. Метод Фурье дает необходимые данные,

но возникают сложности с интерпретацией, когда пиков много. Характерный Фурье – спектр осцилляций с биениями представлен на рис. 2. Уже из рис. 2 видно, что пиков много и их идентификация затруднена.

Требуется модифицировать метод Сладека, чтобы при сопоставлении с результатами Фурье – анализа получить полную картину. Для этого из теории биений известно, что биения возникают при близких частотах гармоник ω_1 и ω_2 , причем основная частота колебаний совпадает с частотой одной из гармоник ω_1 , а амплитуда осциллирует с частотой $\Delta\omega = |\omega_1 - \omega_2|$. Это позволяет оценить частоту ω_1 , а следовательно и концентрацию одной из гармоник, а также разностную частоту $\Delta\omega$ и концентрацию по осцилляциям амплитуды (можно ориентироваться на огибающую по максимумам или по минимумам), а из этого и соответствующие параметры второй гармоники.

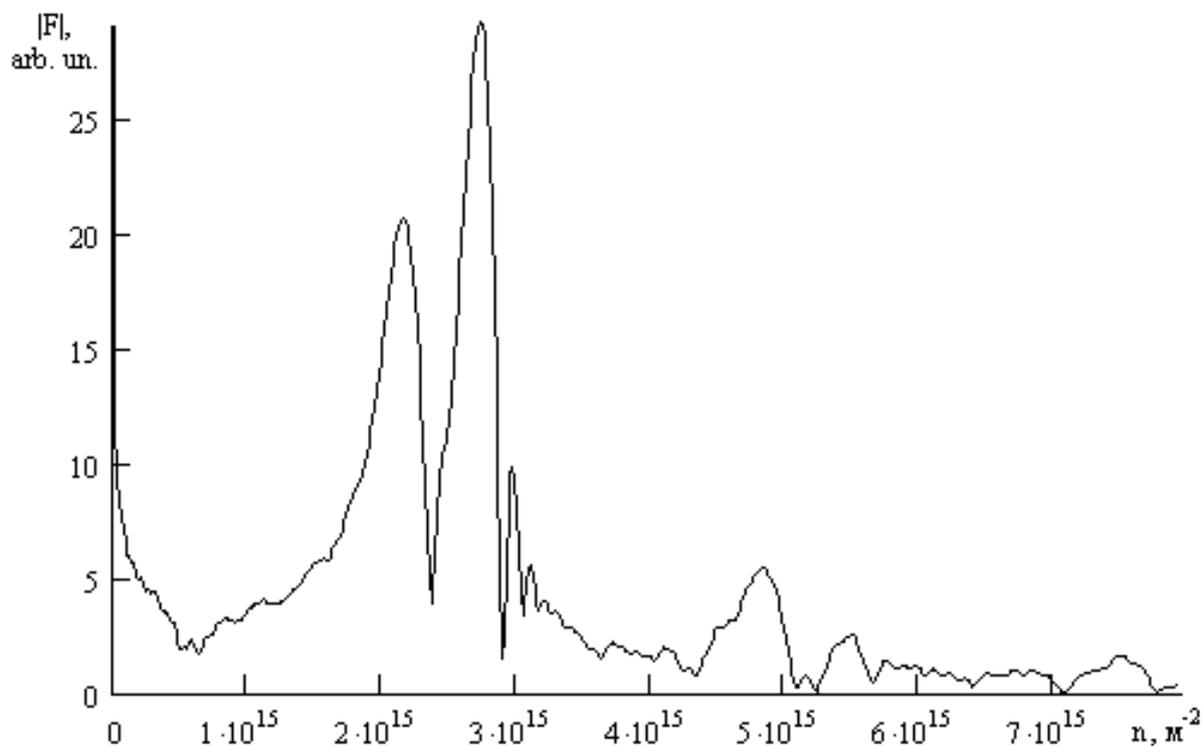


рис. 2.

Сопоставляя полученные этим методом результаты с данными Фурье- анализа, мы можем точно идентифицировать пики и по ним определить все остальные параметры гармоник (температуру Дингла и фазу осцилляций).

Для приведенных на рис. 1 осцилляций данные, полученные подобным комплексным методом, хорошо согласуются с данными, полученными другими способами, в том числе из эффекта Холла.

Комплексное применение метода Сладека и метода Фурье – анализа позволяет получать всю необходимую информацию из осцилляций, усложненных биениями, что было бы невозможно при применении только одного метода анализа.

Список публикаций:

[1] Н.С. Аверкиев, А.М. Монахов, Н.И. Саблина, Р/М/ Koenraad. *ФТП*, **37(2)**, 169-172(2003). [2] M. Sluzky, O. Entin-Wohlman, Y. Berk et al. *Physical Rev. B*, **53(7)**, 4065-4072(1996).

Электронное строение карбонатов щелочных металлов.

Федоров Игорь Александрович

Кемеровский Государственный Университет

Журавлев Юрий Николаевич, к.ф.-м.н

f992fia@ic.kemsu.ru

В настоящей работе рассматривается электронное строение изоструктурных моноклинных кристаллов карбонатов калия и рубидия с числом формульных единиц равным четырем. В кристалле K_2CO_3 атомы калия и кислорода образуют с углеродом неэквивалентные связи с расстояниями: C-O1=1.278 Å, C-O2=1.317 Å, C-O3 =1.276 Å, K1-C=3.251 Å, K2-C=3.452 Å. Таким образом, число подрешеток равно шести.

Расчет зонной структуры выполнен в рамках теории функционала локальной электронной плотности методом псевдопотенциала в базисе численных атомных sp^3d^5 псевдоорбиталей. Плотность состояний $N(E)$ вычислена методом интерполирования энергетических зон симметризованными рядами Фурье. Была рассчитана валентная ρ , разностная $\Delta\rho$ и подрешеточная электронная плотность. Разностная плотность определяется вычитанием из кристаллической плотности всех подрешеточных и может принимать как положительные, так и отрицательные значения.

Рассмотрим вначале плотность состояний карбонатов калия и рубидия (см. рис.1). За нуль энергии выбрана вершина валентной зоны. Нижние связи имеют плоский характер и отделены друг от друга широкими запрещенными зонами до 15 эВ. С ростом энергии ширина связей увеличивается, а ширина запрещенных зон уменьшается. Три нижние связи являются результатом расщепления двух молекулярных орбиталей CO_3^{2-} и вклады кислорода в них являются определяющими. В образовании верхней связи валентной зоны с шириной примерно 1 эВ больший вклад вносит O2.

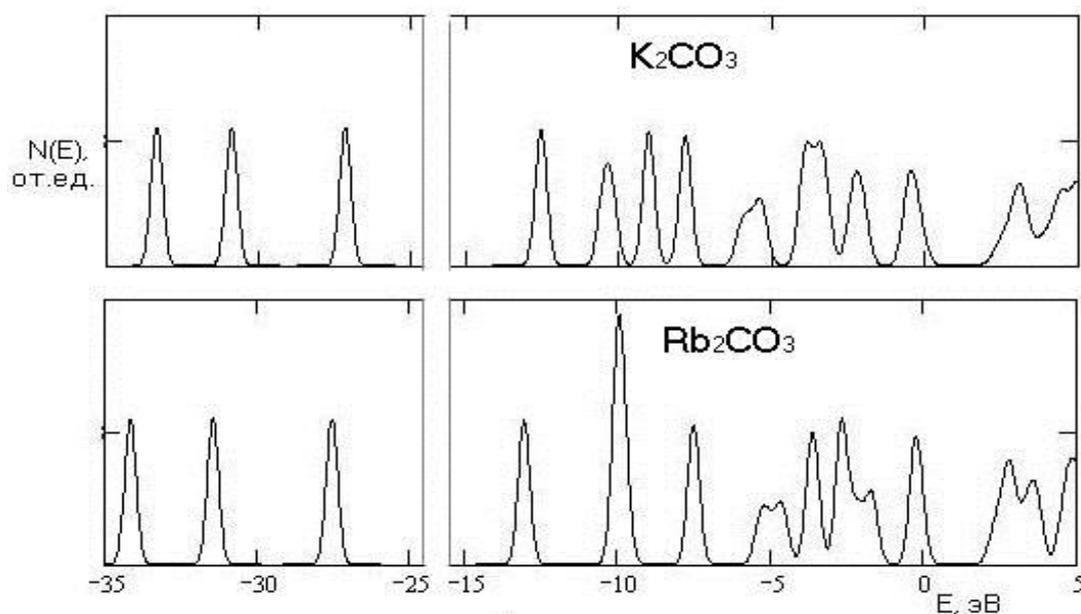


рис.1. Плотность состояний $N(E)$.

Использование карт электронной плотности позволяет выяснить пространственное распределение заряда в кристалле, что дает возможность определить тип химической связи. Более удобными для использования являются карты разностной плотности, позволяющие

определить, в какие области заряд натекает, а из каких вытекает. Отличие заключается в том, что карты ρ определяют распределение, а карты $\Delta\rho$ перераспределение плотности валентных электронов, что позволяет узнать, как образуется химическая связь.

Распределение ρ и $\Delta\rho$ в кристалле K_2CO_3 было вычислено в плоскости O1-C-O3. O2 располагается очень близко к данной плоскости, что позволяет рассмотреть и его вклад. Проанализируем вначале распределение ρ (см. рис.2). Максимальное значение реализуются на трех атомах кислорода и равно $1.2 e \cdot \text{Å}^{-3}$. Плотность вблизи атома углерода равна $0.6 e \cdot \text{Å}^{-3}$. Это объясняется тем, что у кислорода число валентных электронов больше чем у углерода. Как видно из рисунка между атомами находится повышенная электронная плотность, за счет которой и образуется химическая связь. Также атомы обладают общими контурами с большими значениями, что означает ковалентный тип связи. Если вычислить электронную плотность вблизи атома калия то окажется, что она очень мала. А это означает, что связь между анионом и катионом носит преимущественно ионный характер.

Рассмотрим распределение разностной плотности (см. рис.2). Как видно области натекания (выделено серым цветом) и вытекания заряда для атомов кислорода имеют искаженную гантелеобразную форму p-орбиталей. Для атома O1 наблюдается вытекание заряда из π -области и натекание в σ -область. В результате на линии связи O1-C появляется максимум разностного заряда. Для атомов O2, O3 наоборот, заряд вытекает из σ - и натекает в π -область и на линии связи O-C появляется минимум разностной плотности. Следовательно, в кристалле связь O1-C является более прочной.

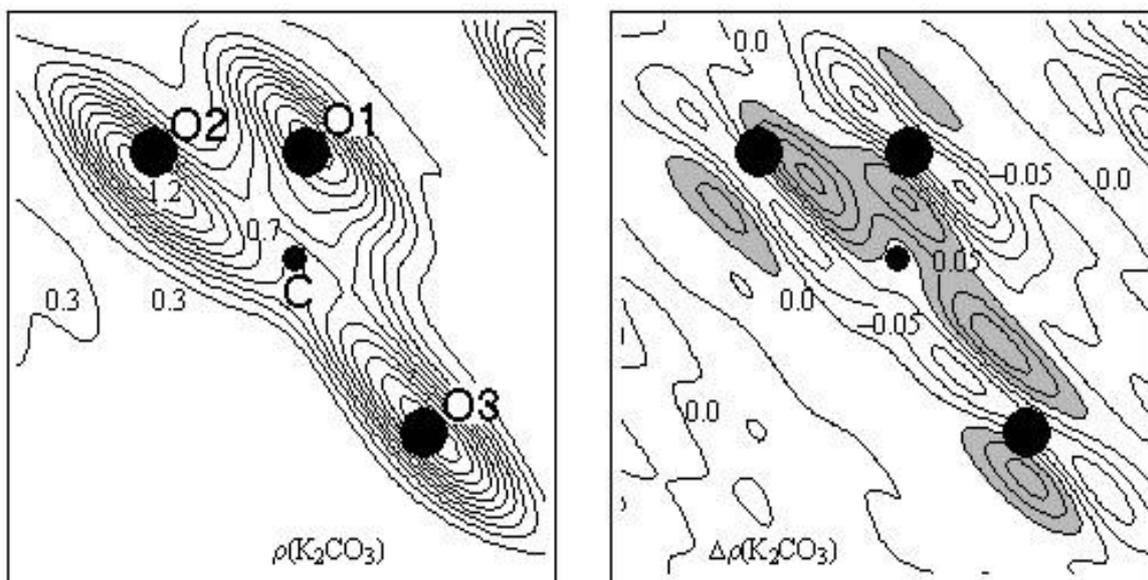


рис.2 Валентная электронная плотность (слева) и разностная плотность (справа) для карбоната калия

Все выше сказанное применимо и к кристаллу Rb_2CO_3 , который имеет подобное распределение разностной плотности.

Диффузия поверхностной фазы Si(111) 4x1-In с учётом ориентации вицинальной подложки

Филиппова Лилия Владимировна

Борисенко Елена Анатольевна, Свитнев Андрей Алексеевич

Дальневосточный Государственный Университет

Институт Автоматики и Процессов Управления

Гаврилюк Юрий Леонидович, д. ф.-м. н

philipp1@iacp.dvo.ru

Одной из актуальных задач современной микроэлектроники является уменьшение размеров полупроводниковых приборов. При миниатюризации приборов до атомных размеров возникают квантовые эффекты. Для электроники интересна проблема получения квантовых проволок. В данной работе исследуется однодоменная фаза Si(111)4x1-In, поскольку известно, что проводимость такой фазы анизотропна, а, следовательно, в дальнейшем фаза может быть использована как квантовая проволока.

В данной работе проведён анализ возможных методов получения однодоменной фазы Si(111) 4x1-In. В изученных нами работах, авторы получали монокристаллическую структуру на атомарно чистой вицинальной подложке Si(111) преимущественно двумя способами с небольшими вариациями (тип основных носителей, сопротивление подложки). В первом случае, при комнатной температуре напылялось от 1,4 до 2 МС In, а затем происходил прогрев образца приблизительно при 450÷500°C. Во втором случае при температуре подложки в 500°C напылялось около 10 МС индия. Независимо от способа получения одновременно с однодоменной (1D) Si(111) 4x1-In наблюдались следующие фазы индия: (1x1)R30°, $\sqrt{7x\sqrt{3}}$ и 3D 4x1.

Исследования проводились в двухкамерной установке RIBER LAS-600 при базовом давлении 10^{-10} Торр. В качестве подложки использовался вицинальный Si(111) КЭФ. Рост плёнок контролировался посредством оже электронной микроскопией. Кристаллическая структура отслеживалась с помощью ДМЭ. В отличие от рассмотренных работ, мы напыляли In через щелевую маску, используя полученную полосу индия в как бесконечный источник металла. Затем, за счёт прогрева образца при 500°C, происходила диффузия 1D 4x1 за пределы напылённой полосы. В результате получалось две фазы. Количественные измерения, показали их идентичность, в то время как ДМЭ продемонстрировал избранное направление направлениях роста у 1D фазы. 3D 4x1 формировалась за счёт десорбции в области напылённой полосы. 1D 4x1 образовывалась за пределами напылённой полосы за счёт механизма “развёртывающегося ковра”.

Модификация ИК- и ЭПР-спектров при старении карбиноидов

Хайруллина Наталья Ароновна

Соколова Мария Николаевна, Маргамов Ирик Гаязович

Федий Александр Алексеевич

Челябинский Государственный Педагогический Университет

Песин Леонид Абрамович, д.ф.-м.н

po_nadu@cspi.urs.ac.ru

Исследовались карбиноидные материалы, полученные из частично кристаллического поливинилиденфторида марки Купар методом химического дегидрогалогенирования. Дегидрогалогенирующая смесь состояла из насыщенного раствора КОН в этаноле и ацетона (в объёмном отношении 1:9). Реакция проводилась при комнатной температуре. Образцы различались продолжительностью химического воздействия - 1 час и 24 часа. В процессе реакции первоначально прозрачные образцы меняли цвет на коричневый, более интенсивный в последнем случае.

Идея наших экспериментов такова: достоверно известно, что карбиноиды стареют, что проявляется в изменении их физических и химических свойств при хранении. Мы предположили, что наиболее существенная модификация структуры происходит в течение достаточно коротких промежутков времени сразу после синтеза.

ИК- и ЭПР-спектры регистрировались ежедневно в течение первых 15 дней, затем один раз в неделю в последующие 2 месяца. Образцы хранились в темноте. При анализе ИК-спектров были измерены площади под участками кривых поглощения, соответствующими двойным углерод-углеродным связям (S_1) и связям С-Н (S_2). Пик С=C располагается в интервале от 1488 до 1936 см^{-1} , а пик С-Н - от 2800 до 3200 см^{-1} . Мы полагали, что связь С-Н достаточно стабильна, поэтому данные нормировались по S_2 . На рисунке 1 представлена зависимость отношения S_1/S_2 от времени с момента синтеза, позволяющая судить об изменении концентрации двойных С=C связей при старении исследуемых образцов. Заметный рост числа двойных связей происходит в течение первых 350-400 часов, далее наблюдается некоторая стабилизация сигнала.

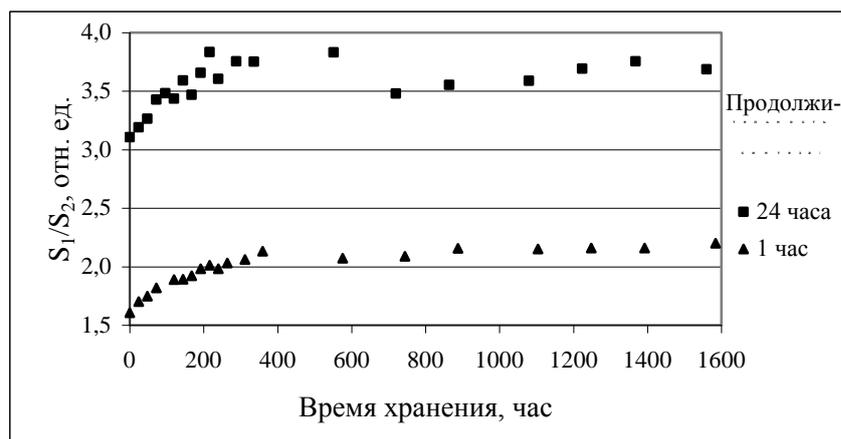


рис. 1

Увеличение концентрации С=C-связей подтверждается также данными ЭПР-поглощения, полученными параллельно. Интенсивность сигнала, имеющего g -фактор, близкий к 2, и обусловленного, скорее всего, наличием свободных радикальных состояний в образце, резко уменьшается приблизительно в течение такого же промежутка времени и в дальнейшем стабилизируется.

Эти особенности ЭПР-поглощения можно интерпретировать следующим образом. В процессе дегидрогалогенирования из ПВДФ уходят атомы F и H и образуются свободные углеродные радикальные состояния, которые дают вклад в сигнал ЭПР при $g=2$. Чем дальше происходит реакция, тем больше ненасыщенных связей в образце и тем интенсивнее сигнал. Образовавшиеся свободные радикальные состояния являются короткоживущими. Дальнейшее замыкание свободных связей двух радикалов в соседних узлах цепи приводит к образованию двойных связей. Ненасыщенных связей становится меньше, что приводит к уменьшению сигнала ЭПР. Таким образом, в исследуемых образцах могут образовываться фрагменты со структурой, соответствующей кумуленовой цепочке карбина. Такое увеличение числа двойных связей подтверждается анализом ИК-спектров (рис. 1).

Свободные радикалы могут также рекомбинировать, образуя межцепочечные сшивки. Сшивки являются σ -ловушками для π -электронов. Эти неспаренные электроны дают сигнал при $g=2$. Наличие таких локализованных электронов объясняет существование сигнала ЭПР по истечении значительного промежутка времени после синтеза. Таким образом, количество сшивок можно оценить по интенсивности сигнала ЭПР, обусловленного локализованными π -электронами.

Пик, отвечающий за колебания двойных C=C связей в ИК-спектрах, имеет сложную структуру (рис. 2). Низкочастотный компонент, наблюдаемый непосредственно после синтеза, свидетельствует о наличии стабильных галоген-замещенных полиеновых структур в карбиноидах, возникших в процессе химической реакции. Такой тип двойных связей не дает вклад в сигнал ЭПР. В процессе старения карбиноидов наблюдается рост компонента с более высокой частотой колебания, который, по нашему мнению, соответствует другому, менее массивному типу двойных связей, образующихся при замыкании радикалов (рис. 2). Последовательность нумерации на рисунке соответствует хронологии измерений.

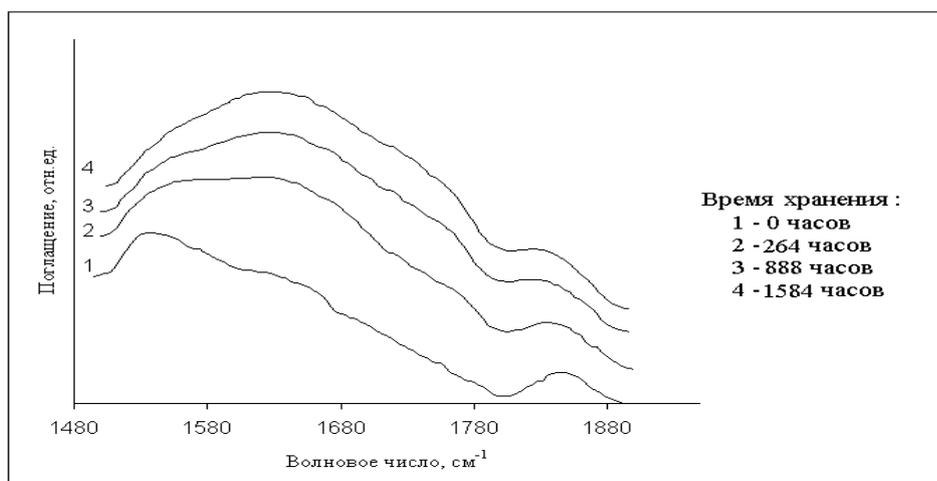


рис. 2

Таким образом, в синтезированных нами карбиноидных материалах сосуществуют два типа двойных C=C связей: галоген-замещенные полиеновые структуры и кумуленовые цепочки.

Исследование порогового поля процессов переполяризации дефектных кристаллов группы ТГС

Хоник Светлана Витальевна

Денисова Валерия Евгеньевна

Воронежский Государственный Университет

Дрождин Сергей Николаевич, д.ф-м.н

skhonik@mail.ru

Изучение динамики доменов в сегнетоэлектриках важно для понимания фундаментальных основ свойств этих материалов и их возможных технических применений.

Наличие дефектов разной природы приводит к существенным изменениям, и как следствие - сегнетоэлектрических свойств кристаллов группы ТГС.

В настоящей работе изучалась зависимость эффективной диэлектрической проницаемости ϵ_{eff} от амплитуды приложенного электрического переменного поля E_0 для кристаллов дейтерированного ТГС (ДТГС) и ТГС, легированного ионами хрома. Измерения проводились с помощью схемы Сойера-Тауэра. Были также определены внутренние смещающие поля при различных частотах переменного поля. Величина внутреннего поля оценивалась по смещению петли диэлектрического гистерезиса вдоль оси E . Образцы исследуемых кристаллов представляли собой пластины полярного среза с серебряными электродами, нанесенными в вакууме.

Исследуемые образцы ТГС, легированного хромом, имели внутреннее смещающее поле $E_{\text{вн}} \approx 200 - 500 \text{ В/см}$. Кристаллы ДТГС тоже обладают небольшим, но стабильным относительно внешних воздействий внутренним полем (100 – 200 В/см). Причиной возникновения внутреннего поля в сегнетоэлектрических кристаллах являются дефекты кристаллической структуры различного происхождения. Механизмы возникновения внутреннего поля в примесных кристаллах связывают с полем объемных электрических зарядов и механических напряжений. Поскольку степень дейтерирования образцов ДТГС составляла примерно 80%, то в этом случае дефектом, создающим внутреннее поле, можно считать незамещенную дейтерием часть протонной подсистемы кристалла.

Показано, что зависимость эффективной диэлектрической проницаемости ϵ_{eff} от амплитуды измерительного поля имеет ярко выраженный пороговый характер (рис1). Если значения амплитуды приложенного поля меньше некоторого порогового значения, то значения ϵ_{eff} практически не зависят от приложенного поля, а при более высоких амплитудах начинается достаточно резкий рост ϵ_{eff} . Величина порогового поля характеризует порог подвижности доменных границ, и, в отличие от другой динамической характеристики, – коэрцитивного поля, которое измеряется по петле гистерезиса и относится к резко неравновесному состоянию кристалла, является характеристикой практически равновесной доменной структуры. Величина порогового поля зависит от частоты приложенного поля и от температуры.

Эффект существования порогового поля является характерным свойством кристаллов с дефектами. Он либо отсутствует, либо очень слаб в чистом ТГС.

Можно предполагать, что пороговое поле характеризуется непосредственным взаимодействием доменных стенок с дефектами и характеризует в этом случае энергию отрыва доменной стенки от дефекта. При повышении температуры величина порогового поля уменьшается, так как толщина доменной стенки увеличивается, и ослабевает взаимодействие доменных стенок с дефектами.

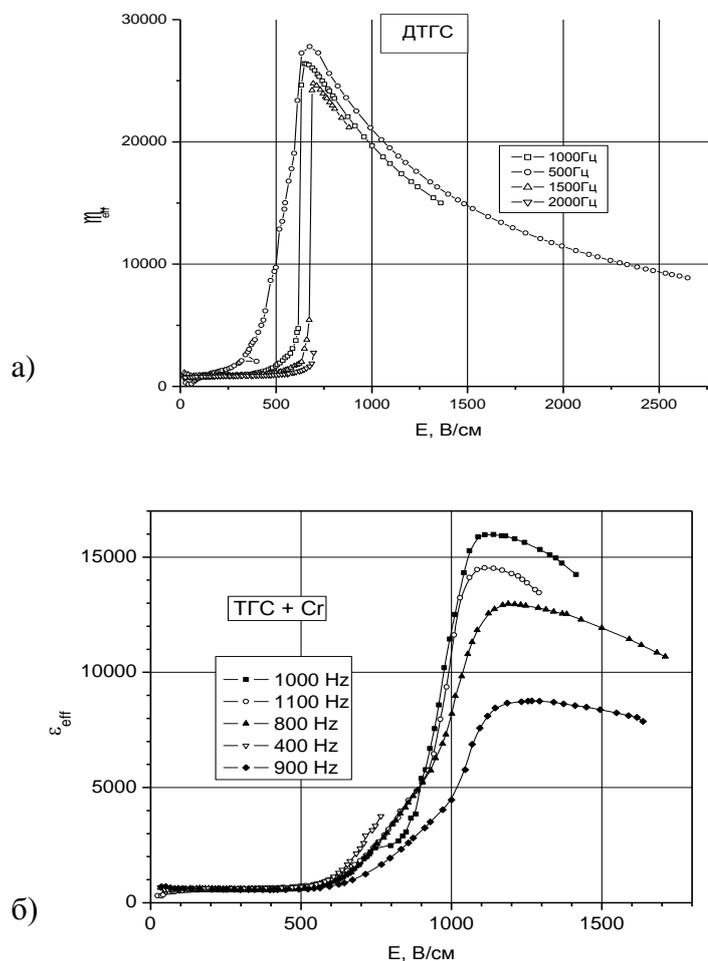


рис.1 Зависимость эффективной диэлектрической проницаемости кристаллов ДТГС а) и ТГС+Сr б) от амплитуды приложенного поля при различных частотах.

Температурно - частотные исследования диэлектрической проницаемости кристаллов ниобата натрия

Чан Тхи Битъ Нгок

Ростовский Государственный Университет

Сидоренко Евгений Никифорович, к.ф.- м.н

tt@phys.rsu.ru

В работе [1] выполнены температурные исследования диэлектрической проницаемости (ϵ) монокристалла ниобата натрия (NaNbO_3) в области частот 20 Гц-1МГц и вблизи температуры фазового перехода ($T \geq T_C$) обнаружена сильно выраженная диэлектрическая релаксационная дисперсия. Она обусловлена, как считают авторы, поляризацией полярных областей, возникающих в переменном электрическом поле и являющейся причиной глубокой диэлектрической дисперсии ϵ . Антисегнетоэлектрик NaNbO_3 исследуется более 40 лет, но авторы работы [1] впервые получили такие результаты.

В данной работе выполнены аналогичные исследования кристаллов ниобата натрия в диапазоне частот от 10^3 - $5 \cdot 10^6$ Гц. Кристаллы имели напыленные платиновые электроды. Результаты измерений представлены на рис.1.

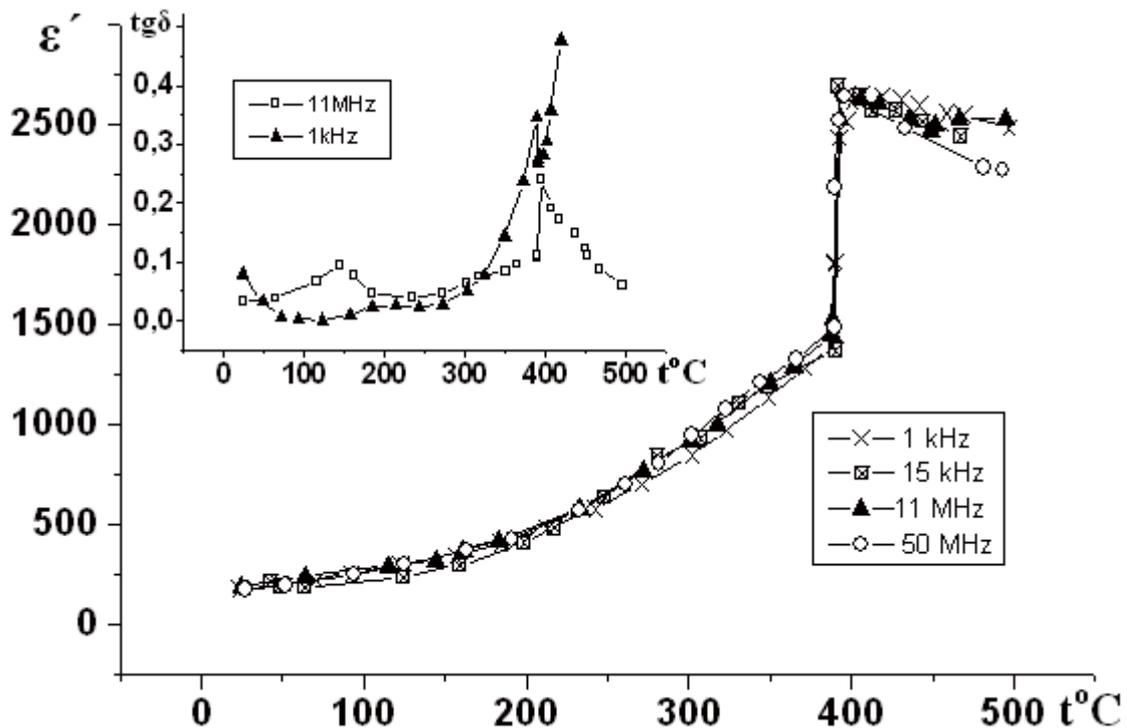


рис 1: Температурные зависимости действительной части диэлектрической проницаемости ϵ' кристалла ниобата натрия измеренные на частотах 1кГц, 15кГц, 11МГц и 50МГц.

На вставке: температурные зависимости тангенса угла диэлектрических потерь кристалла ниобата натрия на частотах 1кГц и 11МГц.

На рисунке (см. рис.1) показаны температурные зависимости действительной части комплексной диэлектрической проницаемости ϵ' , полученные при нагревании образца. Видно, что при температуре $T = 393^\circ\text{C}$ наблюдается четкий максимум, соответствующий фазовому переходу. В пределах ошибки измерений ($\Delta\epsilon'/\epsilon' \approx 3-5\%$) значения ϵ' в максимуме измеренные на различных частотах практически одинаковы и равны ~ 2600 .

На частоте 1кГц в области $T = T_C$ на кривой $\text{tg}\delta(T)$ имеется максимум, но при $T > T_C$ $\text{tg}\delta$ резко возрастает при увеличении температуры ($\text{tg}\delta \approx 2-3$ при $T = 500^\circ\text{C}$). Мнимая часть

диэлектрической проницаемости ϵ'' также резко увеличивается с ростом T в области $T \geq T_C$. Однако, высокие значения $\text{tg}\delta$ и ϵ'' на низких частотах обусловлены, по-видимому, не релаксационными процессами, а высокой электропроводимостью NaNbO_3 , вклад которой на высоких частотах невелик.

Таким образом, полученные нами результаты позволяют утверждать, что в исследованной области температур и частот в кристаллах ниобата натрия в окрестности фазового перехода отсутствуют релаксационные явления, обнаруженные в работе [1].

Значения диэлектрической проницаемости измеренные на частоте 50МГц при $T > T_C$ на (5-7) % меньше соответствующих низкочастотных значений ϵ' измеренных на частоте 15кГц резонансным способом. Это свидетельствует о наличии неглубокой диэлектрической дисперсии в кристаллах NaNbO_3 , сопровождаемой повышенными значениями мнимой части ϵ'' диэлектрической проницаемости в области метровых длин волн.

На вставке (см. рис.1) в температурной зависимости тангенса угла $\text{tg}\delta(T)$ на частоте 11МГц наблюдается четкий максимум в области температур 150°C, где недавно был обнаружен несегнетоэлектрический фазовый переход [2].

На температурных зависимостях ϵ', ϵ'' и $\text{tg}\delta$ кристалла ниобата натрия при его нагревании и охлаждении наблюдается сдвиг максимумов на кривых $\epsilon'(T)$, $\epsilon''(T)$ и $\text{tg}\delta(T)$. Он равен 20-25 °C и указывает на гистерезисный характер зависимостей. Это соответствует литературным данным и подтверждает, что фазовый переход в ниобате натрия является фазовым переходом первого рода.

Таким образом, проведенные нами исследования показали, что в кристаллах ниобата натрия отсутствует диэлектрическая дисперсия в окрестности температуры фазового перехода. По-видимому, результаты полученные в работе [1] связаны с повышенной дефектностью исследованных кристаллов или несовершенством применяемой методики измерений ϵ на низких частотах. Наличие релаксационных процессов в кристаллах PbZrO_3 при $T \geq T_C$, обнаруженных в работе [3], также не подтвердилось при повторных измерениях [4].

Список публикаций:

[1] Konieczny K. and Katoch Cz., *Ferroelectrics*, 215, 65-73 (1998).

[2] Раевский И. П., Резиченко Л. А., Смотряков В. Г., Еремкин В. В., Малицкая М. А., Кузнецова Е. М., Шилкина Л. А., *Письма в ЖТФ*, 26, 16, 97-101 (2000).

[3] Roleder K., Maglione M., Fontana M. D. and Dec J..., *J. Phys.: Condens. Matter.*, 8, 10669 (1996)

[4] Turik A. V., Sidorenko E. N., Raevskii I. P., *Abstract. Book. 7th Intern. conf. electronic ceram. and their appl. electroceramics.VII- 2000. Portoroz. Slovenia*, 84.

Электрические свойства планарной структуры на основе V_2O_5 – геля

Черемисин Александр Борисович

Петрозаводский Государственный Университет

Величко Андрей Александрович, к.ф-м.н

alexiii1982@mail.ru

Фазы внедрения (бронзы, гидраты и т.п.) на основе оксидов переходных металлов обладают уникальными физико-химическими свойствами, которые определяются особенностями кристаллической и электронной структур этих соединений. Они проявляют свойства как основной матрицы оксидов, так и ионов или молекул интеркалатов, например – смешанную электронно-ионную проводимость. Гидратированный оксид ванадия (или ксерогель $\text{V}_2\text{O}_5 \cdot n\text{H}_2\text{O}$), являющийся объектом исследования настоящей работы, принадлежит именно к этому классу материалов и при исследовании его свойств при различных внешних

воздействиях, может быть получена богатая информация относительно взаимосвязи электронных и ионных процессов и закономерностей зарядо- и массопереноса в конденсированной фазе.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния электрического поля E на резистивные свойства геля и исследованию динамической вольтамперной характеристики (ВАХ). Образец представлял собой стеклянную подложку, на которую методом термического испарения напылялись плоские никелевые контакты. Промежуток между контактами, равный 140 мкм, покрывался ксерогелем V_2O_5 , который через сутки высыхал и образовывал тонкую пленку толщиной 0.5-1 мкм. Полученная таким образом пленка имеет квазиоднородную слоистую структуру, при этом слои V_2O_5 образованы спутанными волокнами, и соединены молекулами воды (см. рис. 1 а,б).

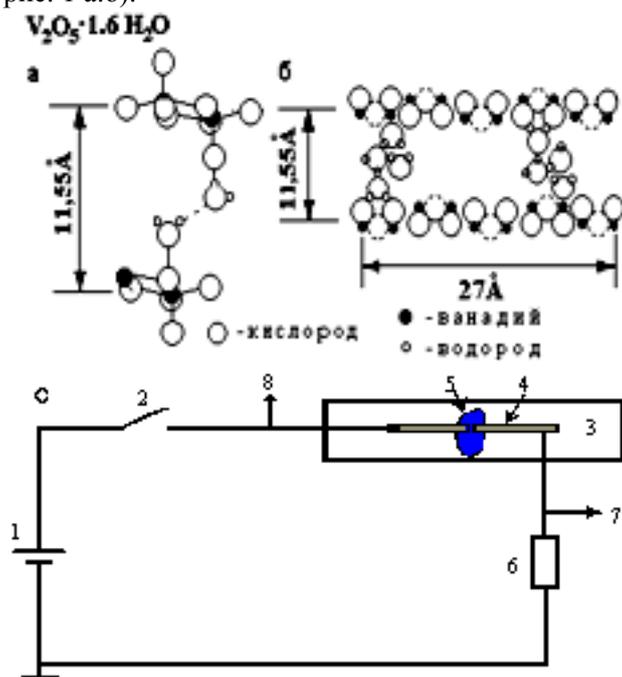


рис. 1. Структура ксерогеля $V_2O_5 \cdot 1.6 H_2O$ (а, б), с- рабочая схема: 1-источник регулируемого постоянного напряжения, 2 – ключ, 3 – стеклянная подложка, 4 – никелевые электроды, 5 – пленка V_2O_5 геля, 6 – токовый резистор 100 Ом, 7,8 - выходы на осциллограф или самописец.

Физические свойства геля зависят от свойств фазы оксида V_2O_5 , жидкой фазы (воды) и межфазного пространства, при этом электронная проводимость обусловлена прыжками электронов между локализованными состояниями на V^{4+} и V^{5+} ионах, а ионная - диффузией (миграцией) протонов[1].

Для проведения эксперимента была реализована схема, представленная на рисунке 1.с. Для исключения различного рода внешних воздействий структура помещалась в металлическую коробку, экранировалась. На рисунке 2.а представлены полученные в ходе эксперимента зависимости сопротивления структуры от времени (после замыкания ключа) при разных значениях приложенного электрического поля. При превышении некоторой критической величины электрического поля ($E_k = 15 \cdot 10^3$ В/м), происходит скачкообразное падение сопротивления структуры (кривая 2), после чего устанавливается относительное равновесие. С дальнейшим увеличением поля, прикладываемого к структуре, скачек сопротивления увеличивается (кривая 3), а при достижении напряженности порядка $150 \cdot 10^3$ В/м, структура начинает разрушаться.

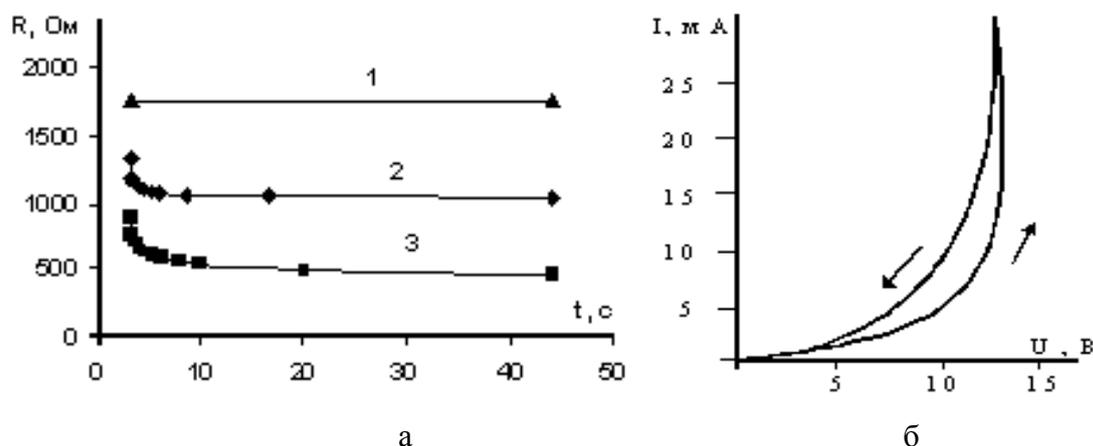


рис. 2. а – Временная зависимость сопротивления структуры с момента подачи напряжения от источника, 1 – $E=10 \cdot 10^3$ В/м, 2 – $E=50 \cdot 10^3$ В/м, 3 – $E=80 \cdot 10^3$ В/м; б – динамическая ВАХ структуры ($f=1$ Гц).

Физический механизм падения сопротивления со временем, по нашему мнению, заключается в том, что после подачи разности потенциалов на планарную структуру, в ней возникает электрическое поле, которое приводит к дрейфу протонов водорода к катоду (сухой электрохромный эффект [1]). Увеличение концентрации протонов водорода у одного из электродов приводит к увеличению ионной проводимости в этой области, что в итоге влияет на общее снижение сопротивления структуры. Для возникновения движения протонов необходимо приложить некое критическое поле, которое и было измерено в эксперименте. Эффект электрополевой миграции протонов является причиной гистерезиса на динамической ВАХ (см. рис. 2.б).

Таким образом, в данной работе впервые определено критическое поле начала электрополевой миграции протонов и измерена динамическая ВАХ. Данные явления могут быть использованы для создания электронных приборов с реализацией эффекта памяти, задержки электрических сигналов.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и Американского фонда гражданских исследований и развития (CRDF) № PZ-013-02.

Список публикаций:

[1] Казакова Е. Л., Пергамент А. Л., Стефанович Г. Б. Модификация электрических и оптических свойств гидратированного пентаоксида ванадия при электрополевой миграции протонов // Письма в ЖТФ. – 2002. - Т. 28. – N 20. - С.35-41.

Формирование центров чувствительности и их роль в образовании металлического серебра на поверхности МК AgBr

Черемисина Варвара Геннадьевна

Морозова Татьяна Владимировна

Кемеровский Государственный Университет

Созинов Сергей Анатольевич

Tania@phys.kemsu.ru

Одним из методов выявления активных мест и дефектов поверхности является вакуумное осаждение металлов. Возможности этого метода при исследовании поверхности галогенидов серебра были продемонстрированы в [1] на примере тонких пленок полученных осаждением в

вакууме. Используя метод декорирования, Панов в своей работе сравнил размер и число образующихся кластеров при осаждении одинакового количества серебра на сенсibilизированную и несенсibilизированную поверхность. Было показано, что на сенсibilизированной поверхности образуется большее число более мелких частиц серебра в сравнении с несенсibilизированной. Увеличение числа частиц серебра связано с увеличением активных мест на поверхности после сенсibilизации. В дальнейшем метод визуализации активных мест (центров чувствительности) был развит в [2]. В настоящее время в практике декорирования поверхности галогенидов серебра используются два метода: обычный – вакуумное осаждение различных металлов, таких как Au, Ag, и фотографический – засветка. Для визуализации образующихся кластеров металла используется техника «голодного» проявления. Исследования, проведенные с применением этих методов для тонких пленок AgBr подвергнутых различным типам сенсibilизации (сернистой, сернисто-золотой и двухвалентным свинцом) показали, что топография проявленных кластеров зависела от типа сенсibilизации и не зависела от способа декорирования. Например, на поверхности образцов подвергнутых сернистой сенсibilизации формирование проявляемых кластеров серебра, как при осаждении серебра в вакууме, так и в результате засветки, наблюдали только вдоль межблочных границ. В случае сернисто-золотой сенсibilизации наблюдалось почти равномерное распределение проявленных кластеров серебра по поверхности зерен AgBr. Автор [3] показал, что сенсibilизация тонких пленок AgBr тиосульфатом натрия приводит к формированию островков Ag_2S вдоль границ зерен. Приведенные результаты позволяют сделать вывод о том, что декорирование выявляет некие активные центры, созданные в процессе сенсibilизации. Эти центры, вероятно, являются центрами чувствительности. Известно, что на фотографические свойства эмульсионных микрокристаллов сильно влияет огранка, то есть индексы грани, размер, а также r_{Ag} созревания. Поэтому представляет интерес исследовать влияние перечисленных параметров на особенности формирования кластеров металла на поверхности микрокристалла AgBr. В представленной работе были проведены исследования поверхности эмульсионных микрокристаллов до и после химической сенсibilизации, различных размеров октаэдрического и кубического габитуса.

Список публикаций:

- [1] Haefke H., Krohn M., Panov A. *The surface structure of vapour-deposited films of AgBr and AgCl. J. Growth* 49.1980.7
- [2] Platikanova V., Starbova K. *Model formation of Latent Image Centers. Photogr.Sci. and Eng., 1978.22.6; Starbova K., Platikanova V. Decoration of Sensitivity Specks. Photogr.Sci. and Eng., 23.1979.107*
- [3] Aznares J.A. *Breakdown of Sodium Thiosulphate on Evaporated Silver Bromide layers, Studied by Electron Microscopy. Photogr. Sci. and Eng., 25.1981.219.*

Получение и свойства тонких пленок окислов олова

Чувенкова Ольга Александровна

Домашевская Эвелина Павловна, Рябцев Станислав Викторович

Воронежский государственный университет

Домашевская Эвелина Павловна, д.ф.-м.н

root@ftt.vsu.ru

Тонкие пленки окисла олова SnO_2 тетрагональной модификации широко применяются в технике благодаря своим свойствам, которые, в значительной степени, зависят от способа и технологических режимов их получения. SnO_2 – широкозонный полупроводник n-типа с шириной запрещенной зоны 3.2 – 3.6 эВ и концентрацией носителей заряда $10^{17} - 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Удельное электрическое сопротивление для таких образцов лежит в диапазоне от нескольких Ом до десятков МОм и обусловлено мелкими донорами – междуузельным оловом с энергией активации ~ 0.02 эВ. Пленки с низким сопротивлением используются как термодинамически

стабильные, прозрачные в видимом и близком ультрафиолетовом диапазоне и одновременно электропроводящие покрытия-электроды, например, в солнечных элементах. Высокоомные пленки нашли применение в качестве резистивных газовых сенсоров.

Использование химических методов получения окисла олова связано с опасностью загрязнения пленки реагентами. Ввиду этого, наиболее совершенные пленки SnO_x получают электронно-лучевым испарением или магнетронным распылением на переменном токе материала соответствующего состава. При этом получение пленок высокого качества требует применения достаточно сложных методик ввиду того, что окисел олова при испарении диспропорционирует. Использование металлического олова в качестве мишени для распыления или испаряемого материала предполагает контролируемое введение кислорода в рабочий объем вакуумной установки. В данной работе предлагается получать окислы олова отжигом на воздухе тонкой пленки металла, осажденной магнетронным распылением на постоянном токе. Используемые технологические методики достаточно просты, что может обеспечить воспроизводимые результаты.

Слои олова наносили на диэлектрические подложки (поликор, плавный кварц) магнетронным распылением на постоянном токе в плазмообразующей среде аргона. Толщина пленок олова составляла ~ 100 нм. Затем металлические пленки окисляли на воздухе в две стадии. Первая стадия включала нагрев пленки до температуры $\sim 200^\circ\text{C}$ (несколько ниже точки плавления Sn) и окислительный отжиг в течение 2 часов. Вторая стадия – медленный нагрев до необходимой температуры ($400 - 800^\circ\text{C}$) и стабилизирующий отжиг в течении 1 часа.

Тонкие пленки олова на подложках плавного кварца, как непосредственно после осаждения, так и после отжига на воздухе исследовали методом рентгенографии и методом рентгеновской дифрактометрии на приборе ДРОН-4. В обоих случаях использовали K_α -излучение меди и никелевый фильтр, образцы анализировали без разрушения. Микроструктуру тонких пленок исследовали методом растровой электронной микроскопии (РЭМ) на приборе Camscan. В процессе окисления проводили измерение электропроводности пленок. Оптические спектры пленок SnO_x снимали на автоматическом спектрометре СФ-56 в диапазоне длин волн $200 - 1100$ нм с разрешением 1 нм.

По данным рентгеновской дифракции возможно образование любой из двух фаз окислов олова $\text{SnO}(\text{T})$ тетрагональной модификации или $\text{SnO}_2(\text{O})$ орторомбической модификации, а также образование $\text{SnO}(\text{T})$ и его последующее превращение в $\text{SnO}_2(\text{O})$. При этом возможно и сосуществование указанных выше фаз как в ограниченном интервале температур, так и во всем изученном нами интервале. Следует заметить, что по литературным данным объемная фаза SnO_2 орторомбической модификации нестабильна при атмосферном давлении, и ее удалось синтезировать лишь при давлении 158 кбар и температуре 800°C . После часового окисления в интервале температур от 400 до 800°C пленки окислов олова имели микрокристаллическую структуру. Микрофотография пленки после окисления при температуре 600°C показывает, что средний размер кристаллитов на снимке составляет 200 нм.

В процессе окисления контролировали электропроводность пленок, что также позволяет судить об изменениях их состава. Можно выделить 3 характерных участка. Первый участок имеет интервал от 230 до $\sim 300^\circ\text{C}$, на котором сопротивление пленки резко увеличивается. На втором участке от 300°C до 450°C происходит быстрое падение сопротивления. Эти наиболее быстрые изменения можно связать с окислением металлической пленки Sn: образованием тетрагонального SnO в первом температурном интервале и его превращением в орторомбический SnO_2 во втором. Первое резкое изменение сопротивления обусловлено сменой металлического характера проводимости на полупроводниковый, что сопровождается одновременным присутствием в пленке нескольких фаз различной природы проводимости с малым размером кристаллов. На третьем участке от 450°C до 750°C происходит более медленное по сравнению с первым участком увеличение сопротивления пленки. Этот участок может быть связан с изменениями в структуре и электронном строении SnO_2 . Таковыми,

очевидно, могут быть рекристаллизация, легирование кислородом, которые сопровождаются изменениями в распределении плотности локализованных состояний в запрещенной зоне полупроводника.

Были проведены исследования оптических характеристик пленок окислов олова. Данные оптической спектроскопии подтверждают изменение фазового состава пленок при повышении температуры их окисления и находятся в достаточно хорошем соответствии с данными по рентгеновской дифракции и электропроводности. Совместный анализ этих результатов дает основание заключить, что в процессе часового окисления тонкой пленки олова сначала образуется фаза тетрагонального окисла SnO, которая при увеличении температуры процесса до 600°C превращается в орторомбический SnO₂. Образование нестабильной фазы высшего окисла олова, по нашему мнению, обусловлено особенностями тонкопленочного состояния (наличие подложки плавленного кварца, эффект толщины). Формирование окислов олова при термообработке в содержащей кислород среде сопровождается диффузией кислорода по границам зерна в пленке. Очевидно, такой переходный процесс Sn - SnO и SnO - SnO₂ может использоваться для получения слоев, содержащих включения одной фазы в другой. В нашем случае такими включениями могут быть Sn в SnO и SnO в SnO₂.

Система параметров для характеристики поверхностной геометрии твердых тел

Шильяев Павел Анатольевич

Нижегородский государственный университет им. Н.И.Лобачевского

Павлов Дмитрий Алексеевич, д.ф.-м.н

shilyaev@phys.unn.ru

Большую роль в физике твердого тела играет изучение поверхностной геометрии материалов различными методами, такими как оптическая микроскопия (ОМ), сканирующая зондовая микроскопия (СЗМ), электронная (ЭМ) и растровая электронная микроскопия (РЭМ) и т.д. Из указанных методов исследования СЗМ дает информацию о трехмерном строении поверхности, то есть информация описывается матрицей высот в каждой точке. Данные о структуре поверхности исследуемого объекта при правильной их интерпретации дают обширную информацию как о состоянии самого объекта, его физических свойствах, так о процессе и особенностях развития и позволяют прогнозировать дальнейшую эволюцию объекта. Но для анализа огромного объема экспериментальных данных необходимо параметризовать поверхность небольшим количеством численных характеристик, полностью описывающих все особенности рельефа и как можно полнее отражающих особенности внутренней структуры самого объекта и его физических свойств. Выявлению наиболее информативной системы параметров для количественной оценки поверхностной геометрии и посвящена данная работа.

Как показывает анализ работ, использующих в своих исследованиях СЗМ, наиболее часто авторами применяются амплитудные параметры рельефа, такие как шероховатость, средняя шероховатость и размах высот. Для простейших задач классификации поверхностей, такой набор параметров вполне обоснован. Амплитудные параметры позволяют классифицировать поверхности по степени «качественности». Но не более того. Поверхности с одинаковой шероховатостью, могут иметь совершенно разную структуру, а объекты обладать различными физическими свойствами.

Проведенное нами простейшее моделирование роста кристаллов методом Монте-Карло, показывает, что шероховатость может сильно варьироваться даже при одинаковых условиях

осаждения, поэтому амплитудные параметры не полно отражают структуру исследуемого объекта [1].

Более информативна в этом плане фрактальная размерность. Эта характеристика как раз отражает структуру самого объекта и непосредственно связана с условиями осаждения, а значит и свойствами [2].

Проведенное нами ранее исследование поверхностной геометрии пленок кремния различных кристаллических модификаций [3] выявило четкую связь фрактальной размерности поверхности с внутренней структурой вещества. Развивая эту идею дальше, можно утверждать, что фрактальная размерность отражает численно как раз ростовые процессы, происходящие во время роста пленки.

Проведенное в настоящей работе исследование пленок кремния на сапфире (КНС) показало, что пленки КНС имеют фрактальную размерность, равную в среднем 2.38. Это лишний раз подтверждает наше предположение о четкой связи параметров осаждения (ростового процесса) и значением фрактальной размерности, сформированной при осаждении. Экспериментально также было выявлено, что для характеристики поверхностной геометрии более всего подходит именно фрактальная размерность, а не шероховатость, которая имеет большой разброс значений и слабую корреляцию с типом рельефа исследуемых пленок.

Большое внимание также уделяется изучению так называемых ростовых показателей [4]. Наиболее ценный параметр из данного семейства – это показатель шероховатости α . Как показало моделирование методом Монте-Карло, сделанное в данной работе, - показатель шероховатости α тоже отражает особенности ростового процесса. Но из исследований поверхностной геометрии КНС, нами было выяснено, что показатель шероховатости очень сильно зависит от способа обработки цифровых данных о рельефе поверхности (например, применение различных видов фильтрации и сглаживания). Фрактальная размерность и шероховатость менее подвержены влиянию цифровой обработки поверхности, поэтому более надежны.

Таким образом, на наш взгляд самыми подходящими параметрами для характеристики поверхностной геометрии твердых являются шероховатость (или один из амплитудных параметров рельефа) и фрактальная размерность. Шероховатость позволяет классифицировать поверхности по размаху его амплитуд, а фрактальная размерность – по типу рельефа. Причем по значению фрактальной размерности поверхности можно определить типы ростовых процессов, происходивших при росте пленки.

Работа поддержана грантом Министерства образования для аспирантов А03-2.9-374.

Список публикаций:

[1] Павлов Д.А., Хохлов А.Ф., Шиляев П.А. Динамика изменения фрактальной размерности ростовой поверхности //Вестник ННГУ.- 2001.-N.4(1).-С.114-123.

[2] Chesters S., Wong H.G., Kasper G. A fractal-based method for describing surface roughness and texture // Proc. of Institute of Environmental Sciences. 1990, 316.

[3] Павлов Д.А., Хохлов А.Ф., Шиляев П.А., Шенгуров Д.В., Шенгуров В.Г. Фрактальность поверхности плёнок аморфного, нано-, микро- и поликристаллического кремния //Поверхность.-2001.-№ 7.-С. 107-112

[4] Varabasi A.-L., Stanley H.E. Fractal concepts in surface growth.-Cambridge University Press, 1995.- 366 p

Расщепление T_{2g} - уровня d-оболочки Co в Na_xCoO_2 , $Na_xCoO_2 \cdot 4x(H_2O)$

Шориков Алексей Олегович

Лукоянов Алексей Владимирович

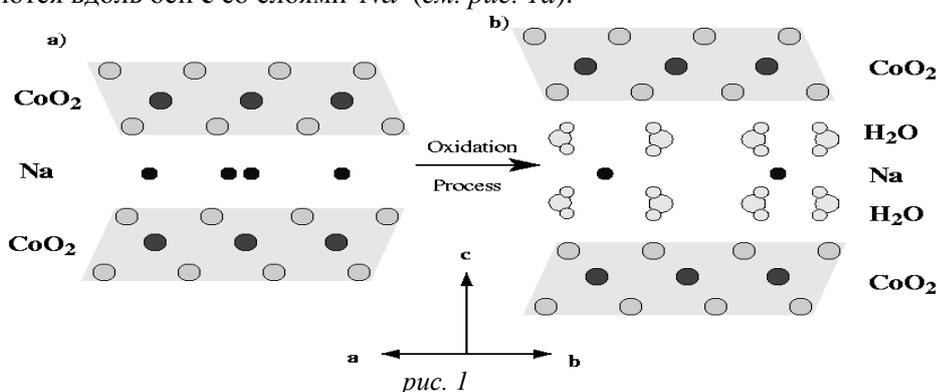
Институт Физики Металлов УрО РАН

Уральский Государственный Технический Университет - УПИ

Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н

shorikov@optics.imp.uran.ru

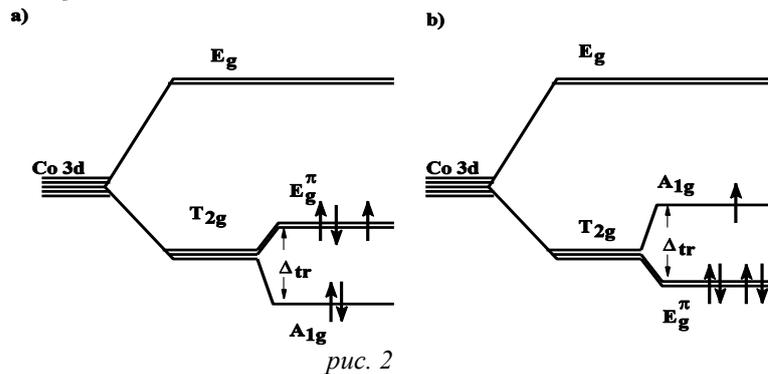
Сообщение об открытии высокотемпературной сверхпроводимости в новом классе слоистых соединений на основе диоксида кобальта - аналога купратов, вызвало большой интерес[1]. Однако, в отличие от купратов, данные соединения кристаллизуются в гексагональной решетке (группа симметрии $R\bar{6}_3/mmc$ [1,2]) и Co располагается в узлах треугольной решетки, для которой характерна магнитная и орбитальная фрустрация. Ион Co находится внутри кислородного октаэдра, а сами CoO_6 октаэдры соединены ребрами. Слои CoO_2 чередуются вдоль оси c со слоями Na (см. рис. 1a).



Na_xCoO_2 проявляет необычные термоэлектрические свойства – для $x = 0.5 \div 0.75$, являясь хорошими металлами, данные соединения имеют очень высокую термо-ЭДС. Однако, в отличие от обычных металлов, величина термо-ЭДС зависит от величины внешнего магнитного поля, и в достаточно сильных полях, когда магнитная фрустрация исчезает, становится равной нулю. В интеркалированном соединении $Na_xCoO_2 \cdot 4x(H_2O)$, в котором между слоями CoO_2 дополнительно вводятся молекулы воды (см. рис. 1b), при этом c-параметр решетки увеличивается с 10.81 \AA до 19.62 \AA [2], наблюдается эффект сверхпроводимости при температуре 5К. По аналогии с купратами $Na_xCoO_2 \cdot 4x(H_2O)$ можно рассматривать как систему, находящуюся в низко-спиновом состоянии Co^{4+} $S = \frac{1}{2}$, допированную электронами (x электронов на атом Co). В ЯМР- экспериментах на $Na_{1/2}CoO_2$ [3] было показано существование двух магнитных классов кобальта Co^{3+} и Co^{4+} , с конфигурацией d^6 и d^5 соответственно, процентное отношение которых составляет 2:1, что может быть объяснено неравномерным распределением ионов натрия. d-оболочка Co является частично заполненной и для ответа на вопрос о существовании в данной системе магнитного и орбитального упорядочений необходимо определить энергию всех 5 d- орбиталей.

В октаэдрическом окружении пятикратно вырожденный (без учета спина) d-уровень Co расщепится в соответствии с точечной группой симметрии на трехкратно вырожденный T_{2g} и

двукратно вырожденный E_g уровни. Вследствие гибридизации с кислородами заселяются только орбитали T_{2g} симметрии. Малые тригональные искажения кристаллической структуры снимут вырождение T_{2g} уровня, и последний расщепится на невырожденный A_{1g} и двукратно вырожденный E_g^π уровень (рис 2.) В зависимости от знака расщепления Δ_{tr} дырка в T_{2g} зоне локализуется либо на линейной комбинации E_g^π орбиталей (рис 2a) - случай орбитального вырождения, либо на A_{1g} орбитали (рис 2b) - орбитальное вырождение снято.



Электронная структура $Na_{0.61}CoO_2$ и $Na_{1/3}CoO_2 \cdot 4/3(H_2O)$, была рассчитана в приближении LDA [4] методом $TB-LMTO-ASA$ [5] без использования подгруппных параметров. Энергии A_{1g} и E_g^π уровней были получены как матричные элементы эффективного гамильтониана, построенного на функциях Ваннье[6].

В данной работе показано, что уровень A_{1g} расположен ниже по энергии для обоих соединений (реализуется случай представленный на рис. 2a), и, следовательно, орбитальное вырождение не снимается. Величина тригонального расщепления для $Na_{0.61}CoO_2$ равна $0,106 eV$. Поскольку в реальной структуре тригональная симметрия незначительно нарушена, вырождение E_g^π снимается, и уровни расщепляются на величину $0,005 eV$. В случае $Na_{1/3}CoO_2 \cdot 4/3(H_2O)$ в зависимости от расположения иона Na позиции Co разделяются по симметрии на 2 класса $Co1$ и $Co2$. Величина тригонального расщепления для $Co1$ и $Co2$ равна $0,111 eV$ и $0,178 eV$ соответственно. Вырождение внутри E_g^π зоны также снято и составляет $0,025 eV$ и $0,003 eV$ соответственно.

Список публикаций:

- [1] K. Takada et al., Nature **422**, 53, (2003),
- [2] J.D. Jorgensen et al., Phys. Rev. B, **68**, 214517 (2003),
- [3] R.Ray et al., Phys. Rev. B, **59**, 9454 (1999),
- [4] W. Kohn, Rev. Mod. Phys., **71**, 1253 (1999),
- [5] O. K. Andersen et al., Phys. Rev. Lett., **53**, 2571 (1984),
- [6] N. Marzari et al., Phys. Rev. B, **56**, 12847 (1997).

Анализ уширенных спектров проводимости самоорганизующихся квантовых точек

Шулгунова Ирина Сергеевна

Румянцев Алексей Юрьевич

*Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет «ЛЭТИ»*

Зубков Василий Иванович, доц., к.ф.-м.н

shulgun@mail.ru

В структурах с квантовыми точками (КТ) реализуется предельный случай пространственного ограничения носителей заряда. Главной особенностью таких структур является δ -образная функция плотности состояний (ФПС), которая потенциально наделяет реальные приборы характеристиками, на порядок превосходящими параметры аналогичных приборов, активной областью которых являются системы с меньшим пространственным ограничением носителей (квантовые ямы, квантовые проволоки и сверхрешетки). Однако, при выращивании реальных структур их ФПС подвержена эффекту неоднородного уширения из-за различия размеров и формы отдельных КТ в ансамбле.

В свете изготовления приборов с контролируемыми в процессе роста характеристиками, желательно знать влияние разброса геометрии на те или иные рабочие параметры, такие как вид оптического спектра, длина волны излучения и другие.

Для исследований, целью которых была разработка алгоритма определения вида ФПС, была выбрана методика измерения емкости и проводимости образцов с самоорганизующимися точками в системе InAs/GaAs. Исследуемые образцы представляли собой диодные структуры, активной областью которых являлись три вертикально связанных слоя КТ. Измерения проводились в диапазоне температур 5..300К, при одновременном воздействии постоянного смещения (+1,0В..-4,0В) и переменного тестирующего сигнала частотой 1кГц..1МГц. В результате измерений были получены следующие зависимости: $C(G/\omega)-T$, $C(G/\omega)-V$, $C(G/\omega)-\lg(f)$. Эмиссии носителей заряда с уровней квантования в КТ соответствуют пики на спектрах проводимости и перегибы со сменой знака второй производной на спектрах емкости.

Проведен анализ физических условий, создаваемых для носителей в системе квантовых точек. Оказалось, что пространственная локализация носителей заряда в КТ, а также положение уровней квантования относительно уровня Ферми объемного кристалла во многом подобно случаю глубоких центров (ГЦ) в полупроводниках. Стоит отметить также принципиальные отличия этих физических объектов. Во-первых, величина энергии активации ГЦ не зависит от величины прикладываемого напряжения, в то время как в КТ величина энергии активации носителя с уровня квантования (энергетическая разница от уровня квантования до верхнего края потенциального барьера, создаваемого разрывом зон) есть функция от смещения на образце. Во-вторых, атомы ГЦ идентичны по своей природе, что не создает уширения соответствующего им энергетического уровня. В структурах с массивом КТ, напротив, существует разброс по энергиям активации обусловленный различием по размерам отдельных КТ, что приводит к неоднородному уширению уровней квантования или функции плотности состояния (ФПС).

Существующая феноменология проводимости и емкости ГЦ в полупроводниках в структурах с р-п-переходами и диодами Шоттки использовалась в модели глубокого уровня (ГУ) для определения свойств КТ. Основной характеристикой ГУ является темп эмиссии, который является функцией, как энергии активации, так и кинетических характеристик ГЦ. Такие же параметры использовались для описания эмиссии носителей с уровней квантования.

В спектрах проводимости были обнаружены два пика, которые были интерпретированы как пики от эмиссии носителей с двух уровней квантования. По полученным спектрам были построены зависимости Аррениуса, наклоны которых определяют энергии активации этих уровней, лежащие в диапазоне 16,3..20,4 мэВ для возбужденного и 38,5..115,2 мэВ для основного, в зависимости от величины приложенного обратного смещения. Результаты подтвердили вышеуказанные отличия структур с КТ и с ГЦ – зависимость от напряжения энергетического положения уровня квантования и уширение спектра проводимости. Эти параметры экспериментальных зависимостей использовались как исходные для моделирования спектра проводимости одиночного уровня. Показано, что при совмещении температурного спектра проводимости массива КТ со спектром проводимости ГУ наблюдается заметное уширение.

Использование модели ГУ позволило также определить степень неоднородного уширения ФПС. При этом за вид ФПС принималась функция Гаусса с регулируемой величиной дисперсии σ в единицах энергии. В ходе определения степени уширения оказалось удобным использовать спектры частотных зависимостей адмиттанса в координатах $G/\omega(C)$ известные как диаграммы Коула-Коула. Исходя из того, что и в системе InAs/GaAs должны проявляться эффекты запаздывания по отношению к внешнему полю, очевидно, что их соотношение подобно соотношению Крамерса-Кронига для комплексных частей диэлектрической проницаемости (для исследования которой также использовались диаграммы Коула-Коула).

Диаграмма неуширенного одиночного уровня представляет собой часть окружности с радиусом, равным величине максимальной проводимости в температурной характеристике. Модификация спектра, связанная с включением гауссова уширения, приводит к деформации окружности. Идентичная форма диаграмм адмиттанса наблюдалась в экспериментальных спектрах. Это дает возможность оценить влияние неоднородного уширения путем подгонки моделирования под эксперимент. Величина модельного уширения, при котором достигается наилучшее совпадение модели с экспериментом, составляет 19%, что согласуется с величиной разброса геометрических размеров КТ в массиве.

Результатом данной работы стала методика определения величины энергии активации (положения уровней квантования) самоорганизующихся квантовых точек в зависимости от внешнего смещения, а также вида функции плотности состояний с учетом явлений неоднородного уширения по диаграммам Коула-Коула. Обработка экспериментальных данных, моделирование спектров емкости и проводимости и их подгонка под реальные зависимости реализована в графической объектно-ориентированной среде Lab VIEW.

Влияние скорости относительной деформации на объем материала вытесненного в навал и уплотнения под отпечатком при динамическом индентировании

Юнак Мария Александровна

Тамбовский Государственный Университет имени Г. Р. Державина

Тюрин Александр Иванович, к. ф.-м. н

tyurin@tsu.tmb

Метод микроиндентирования до сих пор остается одним из наиболее простых и доступных способов неразрушающего экспресс-анализа механических свойств твердых тел. Однако, несмотря на большие достижения касающихся вопросов индентирования (новые методики, аппаратура и полученные качественно новые результаты), до сих пор остается открытым ряд вопросов касающихся поведения материала при внедрении в него жесткого индентора. Один из таких вопросов заключается в том, куда преимущественно перемещается

материал при действии высоких локальных напряжений – внутрь деформированного материала или же материал вытесняется на поверхность вблизи зоны контакта. Имеющиеся в литературе данные относительно числовых значений доли материала вытесненного из-под индентора даже для одного и того материала достаточно противоречивы и не учитывают скоростной зависимости деформации материала при внедрении индентора.

Поэтому целью этой работы было исследовать, куда преимущественно перемещается материал из-под индентора: - в направлении внедрения (в объем материала) или к свободной поверхности (образуя так называемые “навалы” около отпечатка); и как доля материала вытесненного в навал зависит от скорости относительной деформации (в интервале от 10^{-2} до 10^2 с $^{-1}$).

В качестве исследуемых были выбраны материалы, у которых при индентировании “навалы” заведомо образуются (LiF и NaCl).

Отпечатки наносились алмазной пирамидой Берковича под действием треугольного, симметричного импульса нагрузки постоянной амплитуды и варьируемой длительностью фронта нагружения от 10 мс до 100 с. Это обеспечивало эквивалентные условия испытания в диапазоне скоростей относительной деформации от 10^{-2} до 10^2 с $^{-1}$. Измерение объема материала вытесненного в “навал” производилось помощью микроинтерферометра по измерению искривления линий интерференционных полос (см., рис.1).

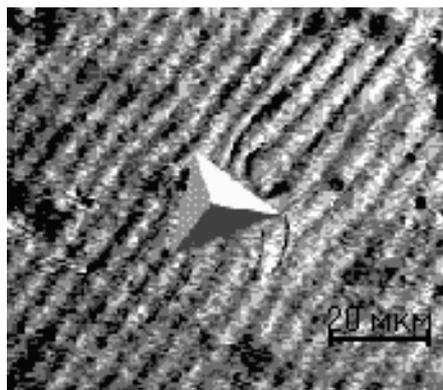


рис.1. Интерференционная картина около отпечатка при индентировании LiF.

В результате установлено, что доля материала вытесненного в “навал” зависит от скорости относительной деформации. Так, например, для LiF в интервале от 10^{-2} до 10^{-1} с $^{-1}$ объем навала слабо зависит от скорости относительной деформации и составляет около 25 % от объема отпечатка, а в интервале от 10^{-1} до 10^2 с $^{-1}$ он уменьшается до 8-10 %.

Таким образом, в работе установлена зависимость объема материала вытесненного в навал от скорости относительной деформации.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 01-02-16573) и МО РФ, грант в области естественных наук (шифр E02-3.4-263).

Адсорбция азото-серосодержащих гетероциклических соединений на поверхности микрокристаллов бромида серебра

Яцына Николай Александрович

Кемеровский государственный университет

Юдин Андрей Леонидович

f982yna@ngs.ru

Подбор соответствующих компонент фотографических систем позволяет оптимизировать этапы фотографического процесса и свойства фотослоев. Адсорбция тиокарбодиазотиновых красителей (КР) на поверхности микрокристаллов (МК) AgBr позволяет значительно повысить чувствительность в широком спектральном диапазоне и представляет интерес в фотографической химии.

Для исследования адсорбции тиокарбодиазотиновых КР на МК AgBr был выбран метод рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Это позволяет установить особенности взаимодействия КР с поверхностью AgBr. Однако по данным РФЭС трудно судить о геометрии молекул КР и о распределении зарядов на атомах. Эта задача была решена с использованием квантово-химических методов расчета электронной структуры молекул КР. На сегодняшний день методы квантовой химии и молекулярной динамики получили широкое распространение в численном моделировании электронной и атомной структур сложных систем молекулярных, кристаллических и переходных (нано) размеров. Все вычисления были проведены с помощью пакета программ HyperChem версии 7.0.

Процессы J-агрегации и адсорбции приводят к изменениям электронного химического состояния молекул красителей и состава поверхности. Анализ РФЭС-спектров и характера химических сдвигов электронных уровней позволил предположить в работе механизм адсорбции спектральных красителей на поверхности МК AgBr, который заключается в образовании связи атомов серы гетероциклических ядер красителей с атомами подложки. Атомы азота катионов красителей принимают участие в формировании самих агрегатов или в межмолекулярной связи при многослойной адсорбции.

При расчётах цианиновых красителей различными полуэмпирическими квантово-химическими методами, были получены длины связей, распределение зарядов на атомах, величина и направление дипольного момента, геометрия молекул.

Моделирование атомного строения показало, что все исследуемые красители имеют плоскую или почти плоскую структуру.

С помощью метода Хартри-Фока была установлена зависимость энергии электронных оболочек ($E_{об}$) N1s и S2p от величины эффективного заряда (q) (рис. 1). Также были рассчитаны зависимости энергии связи ($E_{св}$) электронных уровней атома, полученных в методе РФЭС, от эффективного заряда (рис. 1), и получены зависимости между экспериментальной энергии связи уровня и энергии соответствующей оболочки, полученной теоретическим расчетом $E_{св}(E_{об})$ (рис. 2).

Расчёты показали, что наиболее точным из всех методов оказался метод *ab initio*, так как полученные энергии основных уровней хорошо сходятся с экспериментальными данными с точностью до значения энергии релаксации.

Делается вывод о том, что различия в структуре агрегатов красителей в растворе и на поверхности AgBr, по видимому, связаны с привязкой структуры агрегатов к геометрии решетки адсорбента и наличием сродства к поверхности AgBr. На основании полученных данных и сравнения расстояния S - S в молекуле красителей с параметрами решетки кристаллов AgBr, предположена модель адсорбции симметричных тиокарбодиазидов на поверхность МК AgBr, когда оба атома серы катиона КР расположены над соответствующими соседними

ионами решетки Ag^+ в направлении (220). В этом случае на одну элементарную ячейку приходится один катион красителя, который наклонен на определенный угол.

Результаты работы свидетельствуют о том, что привлечение квантово-химических расчетов к экспериментальным данным метода РФЭС может помочь интерпретировать полученные результаты и точнее понять природу происходящих на поверхности твердых тел процессов.

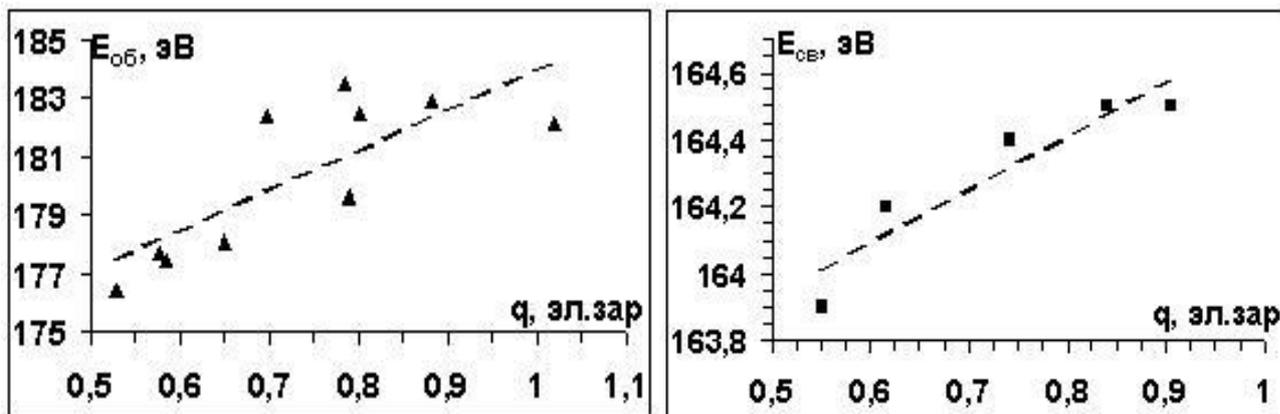


рис. 1 а) Зависимость энергии оболочки 2S атомов серы красителей от величины эффективного заряда.
 б) Зависимость энергии связи 2S атомов серы красителей от величины эффективного заряда.

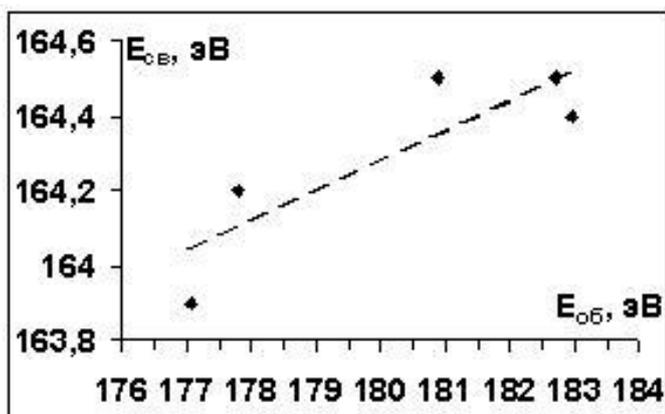


рис. 2. Зависимость энергии связи уровня S2p атомов серы красителей от энергии оболочки S2p.