



## 2-Теория и физика твёрдого тела

Алимагомедов Якуб Альбертович, аспирант 1 года  
Дагестанский Государственный Университет, физический  
**Особенности получения пленок (SiC)1-x(AIN)x методом магнетронного распыления**  
Научный руководитель: Биалалов Биалал Аругович, д.ф.-м.н.  
E-mail: [alimagomedov\\_yak@mail.ru](mailto:alimagomedov_yak@mail.ru) стр. 77

Али-Паша Виталий Альбертович, 4 курс  
Челябинский Государственный Университет, физический  
**Моделирование новой трехмерновязанной структурной разновидности углеродных материалов**  
Научный руководитель: Беленков Евгений Анатольевич, д.ф.-м.н.  
E-mail: [belenkov@cgu.chel.su](mailto:belenkov@cgu.chel.su) стр. 77

Антоненко Анастасия Николаевна, ассистент  
Кузбасская Государственная Педагогическая Академия, физико-математический  
**Влияние нарушений регулярного гофрированного порядка расположения сдвигов на упругую энергию системы.**  
Научный руководитель: Неверов Валерий Владимирович, д.ф.-м.н.  
E-mail: [aman@nvkz.kuzbass.net](mailto:aman@nvkz.kuzbass.net) стр. 78

Антоненко Александр Иванович, ст.преподаватель  
Кузбасская Государственная Педагогическая Академия, физико-математический  
**Особенности решения упругой задачи для плоскости с разрезом без стопоров на краях разреза.**  
E-mail: [aliv@nvkz.kuzbass.net](mailto:aliv@nvkz.kuzbass.net) стр. 80

Афонькина Юлия Николаевна, аспирант 2 года  
Кемеровский Государственный Университет, физический  
**Влияние условий синтеза на эффективность фотопроцесса в гексагональных плоских микрокристаллов AgBr.**  
Научный руководитель: Сечкарев Борис Алексеевич, д.х.н.  
E-mail: [sechkar@kemsu.ru](mailto:sechkar@kemsu.ru) стр. 81

Бабенко Александр Александрович, магистрант 2 года  
Новосибирский Государственный Университет, физический  
**Пассивация гетероструктур HgCdTe/CdTe/ZnTe/Si слоями CdTe**  
Научный руководитель: Якушев М. В., к.ф.-м.н.  
E-mail: [shurick@sibmail.ru](mailto:shurick@sibmail.ru) стр. 82

Баранников Иван Борисович, 5 курс  
Ростовский Государственный Университет, физический  
**Исследование атомной структуры силикатных стекол с различным процентным содержанием железа методом рентгеновской спектроскопии поглощения**  
Научный руководитель: Яловега Галина Эдуардовна, к.ф.-м.н.  
E-mail: [yalovega@ctsnet.ru](mailto:yalovega@ctsnet.ru) стр. 83

Безиков Алексей Александрович, 4 курс  
Тюменский Государственный Университет, физический  
**Определение проницаемости пропанта с синтетическими волокнами**  
Научный руководитель: Семихин Виталий Иванович, к.ф.-м.н.  
E-mail: [nemoalex@rambler.ru](mailto:nemoalex@rambler.ru) стр. 83

Березин Михаил Владимирович, аспирант  
Воронежский Государственный Технический Университет, физико-технический  
**Молекулярно-динамическое моделирование структурных и субструктурных превращений при кристаллизации аморфной пленки Ni на монокристаллической подложке Ag(001)**  
Научный руководитель: Косилов Александр Тимофеевич, д.ф.-м.н.  
E-mail: [trash82@inbox.ru](mailto:trash82@inbox.ru) стр. 85

Блинов Олег Александрович, 5 курс  
Челябинский Государственный Педагогический Университет, физический  
**Рост фрактальных кристаллов в присутствии примеси**

Научный руководитель: Брызгалов Александр Николаевич, д.ф.-м.н.  
E-mail: [blinova@74.ru](mailto:blinova@74.ru) стр. 86

Бодак Ксения Александровна, м.н.с.  
Кемеровский Государственный Университет, физический  
**Влияние комплексных ионов палладия на каталитическую активность центров скрытого изображения в микрокристаллах AgBr.**  
Научный руководитель: Сечкарев Б. А., д.х.н.  
E-mail: [sechkar@kemsu.ru](mailto:sechkar@kemsu.ru) стр. 87

Будяков Алексей Витальевич, 3 курс  
Таганрогский Государственный Радиотехнический Университет, электроники и приборостроения  
**Модель процесса геттерирования примесей полями упругих напряжений**  
Научный руководитель: Филипенко Наталья Андреевна, к.т.н.  
E-mail: [29031985@mail.ru](mailto:29031985@mail.ru) стр. 88

Булычева Анна Александровна, аспирант 3 года  
Томский Политехнический Университет, естественных наук и математики  
**Низкотемпературная электропроводность конгруэнтных кристаллов ниобата лития сильнолегированных окисью магния**  
Научный руководитель: Пичугин Владимир Федорович, д.ф.-м.н.  
E-mail: [Bulychevanna@yandex.ru](mailto:Bulychevanna@yandex.ru) стр. 89

Владимиров Александр Александрович, м.н.с.  
Кемеровский Государственный Университет, физический  
**Влияние локализованных энергетических состояний в AgHal на эффективность протекания фотопроцесса**  
Научный руководитель: Сечкарев Б. А., д.х.н.  
E-mail: [sechkar@kemsu.ru](mailto:sechkar@kemsu.ru) стр. 90

Гаврилова Наталья Владимировна, вед. инженер  
Кемеровский Государственный Университет, физический  
**Исследование влияния условий синтеза на сенситометрические характеристики эмульсионных МК AgBr (111)**  
Научный руководитель: Звиденцова Надежда Семеновна, д.х.н.  
E-mail: [natasha-g@list.ru](mailto:natasha-g@list.ru) стр. 92

Гейнеман Андрей Аркадьевич, 4 курс  
Алтайский Государственный Технический Университет, инженерно-физический  
**Плоские дефекты ориентации (0001) в сплавах HfPt3 и ZrPt3 со сверхструктурой D024**  
Научный руководитель: Баранов Михаил Александрович, д.ф.-м.н.  
E-mail: [drulya@inbox.ru](mailto:drulya@inbox.ru) стр. 93

Герасимова Юлия Валентиновна, аспирант 2 года  
Институт Физики им. Киренского СО РАН,  
**Исследование фазового перехода в оксифториде (NH4)3WO3F3 методом комбинационного рассеяния света**  
Научный руководитель: Втюрин Александр Николаевич, д.ф.-м.н.  
E-mail: [jul@iph.krasn.ru](mailto:jul@iph.krasn.ru) стр. 94

Гимранова Олеся Владимировна, аспирант  
Томский Политехнический Университет, ЕНМФ  
**Роль электронной структуры в процессах неравновесной миграции водорода в металлах**  
Научный руководитель: Коротеев Юрий Михайлович, к.ф.-м.н.  
E-mail: [gimranova@mail.ru](mailto:gimranova@mail.ru) стр. 95

Головка Ольга Владимировна, аспирант 1 года  
Кемеровский Государственный Университет, физический  
**Температурная зависимость зонной структуры сульфата натрия**  
Научный руководитель: Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.  
E-mail: [sister\\_o@rambler.ru](mailto:sister_o@rambler.ru) стр. 96

Головнёва Елена Игоревна, научный сотрудник  
Институт Теоретической и Прикладной Механики СО РАН, лаборатория физики быстропротекающих процессов  
**Исследование связи микро- и мезомасштабных уровней при численном моделировании механических явлений в наноструктурах**  
E-mail: [elena@itam.nsc.ru](mailto:elena@itam.nsc.ru) стр. 98

Гончар Анастасия Александровна, 2 курс  
Ростовский Государственный Университет, физический  
**Метод многократного рассеяния в теории динамической дифракции электронов**  
Научный руководитель: Ведринский Ростислав Викторович, д.ф.-м.н.  
E-mail: [stasia@aanet.ru](mailto:stasia@aanet.ru) стр. 99

Дранников Дмитрий Сергеевич, 4 курс  
Ростовский Государственный Университет, физический  
**Структура и диэлектрические свойства новых фаз Ауривиллиуса:  $\text{Bi}_4\text{Pb}_{1,5}\text{Ti}_{4,5}\text{O}_{16,5}$  и  $\text{Bi}_5\text{Ca}_{0,5}\text{GaTi}_3,5\text{O}_{16,5}$**   
Научный руководитель: Власенко Валерий Григорьевич, к.ф.-м.н.  
E-mail: [unvsko@ctsnet.ru](mailto:unvsko@ctsnet.ru) стр. 99

Дунаев Дмитрий Георгиевич, 4 курс  
Воронежский Государственный Технический Университет, физико-технический  
**компьютерное моделирование одноосной деформации объемного металлического сплава  $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$**   
Научный руководитель: Левченко Елена Владимировна, к.ф.-м.н.  
E-mail: [levchenko@vmail.ru](mailto:levchenko@vmail.ru) стр. 101

Дягилев Денис Владимирович, с.н.с.  
Кемеровский Государственный Университет, физический  
**Модификация гетероконтакта  $\text{AgBr}/\text{AgCl}$  посредством введения примесных ионов  $[\text{IrCl}_6]^{3-}$**   
Научный руководитель: Сечкарев Б.А., д.х.н.  
E-mail: [sechkar@kemsu.ru](mailto:sechkar@kemsu.ru) стр. 102

Жиляков Дмитрий Геннадьевич, аспирант  
Воронежский Государственный Технический Университет, физико-технический  
**Молекулярно-динамическое моделирование ориентированной кристаллизации пленочной гетеросистемы  $\text{Cu}/\text{Ni}(111)$**   
Научный руководитель: Косилов Александр Тимофеевич, д.ф.-м.н.  
E-mail: [dimitrihouse@mail.ru](mailto:dimitrihouse@mail.ru) стр. 103

Жиляков Дмитрий Геннадьевич, аспирант  
Воронежский Государственный Технический Университет, физико-технический  
**Молекулярно-динамическое моделирование ориентированной кристаллизации пленочной гетеросистемы  $\text{Cu}/\text{Pd}(110)$**   
Научный руководитель: Косилов Александр Тимофеевич, д.ф.-м.н.  
E-mail: [dimitrihouse@mail.ru](mailto:dimitrihouse@mail.ru) стр. 104

Зиннуров Ильнур Биктимирович, аспирант 2 года  
Башкирский Государственный Университет, физический  
**Диффузия и ионная проводимость в суперионном проводнике  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$**   
Научный руководитель: Якшибаев Роберт Асгатович, д.ф.-м.н.  
E-mail: [biktimirovich@mail.ru](mailto:biktimirovich@mail.ru) стр. 105

Ишембетов Салават Раисович, 5 курс  
Башкирский Государственный Университет, физический  
**Термо-эдс и электронная проводимость в нестехиометрических сплавах**  
Научный руководитель: Балапанов Малик Хамитович, к.ф.-м.н.  
E-mail: [ishembetovsr@mail.ru](mailto:ishembetovsr@mail.ru) стр. 107

Кожемякина Елена Владимировна, 4 курс  
Новосибирский Государственный Университет, физический  
**Преобладание близнецового процесса образования экситонов в  $\text{AlGaAs}$  при малых интенсивностях фотовозбуждения**  
E-mail: [kozhemiyakina@gorodok.net](mailto:kozhemiyakina@gorodok.net) стр. 109

Колесникова Анна Алексеевна, аспирант  
Самарский Государственный Университет, физический  
**Технология изготовления экспериментальных образцов преобразователей СВЧ мощности**  
Научный руководитель: Комов Александр Николаевич, д.т.н.  
E-mail: [abp@mail15.com](mailto:abp@mail15.com) стр. 110

Концурова Юлия Сергеевна, 4 курс  
Ростовский Государственный Университет, физический  
**Определение параметров структуры координационного окружения титана в  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  с помощью Ti K-XANES спектров**  
Научный руководитель: Бугаев Лусеген Арменакович,  
E-mail: [yulitsa-k@yandex.ru](mailto:yulitsa-k@yandex.ru) стр. 110

Корабельников Дмитрий Васильевич, 4 курс  
Кемеровский Государственный Университет, физический  
**Расчет плотности электронных состояний**  
Научный руководитель: Журавлёв Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.  
E-mail: [sevostyanov@kemsu.ru](mailto:sevostyanov@kemsu.ru) стр. 111

Котляр Татьяна Анатольевна, аспирант 3 года  
Кыргызско-Российский Славянский Университет, естественно-технический  
**Влияние содержания и типов SiC на структуру кремнеземистой керамики**  
Научный руководитель: Каньгина Ольга Николаевна, к.ф.-м.н.  
E-mail: [iky79@mail.ru](mailto:iky79@mail.ru) стр. 112

Кухарь Егор Иванович, аспирант  
Волгоградский Государственный Педагогический Университет, физический  
**Поперечная магнитопроводимость поупроводниковой сверхрешетки в условиях штарковского квантования**  
Научный руководитель: Крючков С.В., д.ф.-м.н.  
E-mail: [sed@fizmat.vspu.ru](mailto:sed@fizmat.vspu.ru) стр. 113

Лемешко Михаил Петрович, 4 курс  
Ростовский Государственный Университет, физический  
**Исследование `запрещенных` брэгговских рефлексов в кристаллическом германии в области аномального рассеяния**  
Научный руководитель: Ведринский Ростислав Викторович, д.ф.-м.н.  
E-mail: [vptv@narod.ru](mailto:vptv@narod.ru) стр. 115

Манохин Петр Владимирович, 4 курс  
Уральский Государственный Технический Университет (УПИ), физико-технический  
**Численный расчет зависимости температуры Кюри от формы затравочной плотности состояний в рамках теории Стонера**  
Научный руководитель: Некрасов Игорь Александрович, к.ф.-м.н.  
E-mail: [pvm@optics.imp.uran.ru](mailto:pvm@optics.imp.uran.ru) стр. 116

Манохин Петр Владимирович, 4 курс  
Уральский Государственный Технический Университет (УПИ), физико-технический  
**Теоретическое и экспериментальное исследование оптической проводимости интерметаллидов  $\text{Pr}_2\text{Fe}_{17}$  и  $\text{Gd}_2\text{Fe}_{17}$**   
Научный руководитель: Некрасов Игорь Александрович, к.ф.-м.н.  
E-mail: [pvm@optics.imp.uran.ru](mailto:pvm@optics.imp.uran.ru) стр. 116

Мезавцов Владимир Евгеньевич, 6 курс  
Воронежский Государственный Университет, физический  
**МДП структура с полиамидным диэлектриком в условиях сорбции паров воды**  
Научный руководитель: Тутов Евгений Анатольевич, к.ф.-м.н.  
E-mail: [mve@box.vsi.ru](mailto:mve@box.vsi.ru) стр. 117

Некрасов Игорь Александрович, с.н.с.  
Институт Физики Металлов УрО РАН,  
**Электронная структура сильно-коррелированных систем**

Научный руководитель: Анисимов Владимир Ильич, д.ф-м.н.  
E-mail: [nekrasov@optics.imp.uran.ru](mailto:nekrasov@optics.imp.uran.ru) стр. 119

Новоселов Андрей Андреевич, 5 курс  
Удмуртский Государственный Университет, физический  
**Влияние ионной имплантации на механические свойства сплава титана OT4**  
Научный руководитель: Баянкин Владимир Яковлевич, д.т.н.  
E-mail: [novhome@ugl.ru](mailto:novhome@ugl.ru) стр. 119

Пасюкова Юлия Александровна, магистрант 1 года  
Челябинский Государственный Университет, физический  
**Моделирование структуры фуллереновых конденсатов C60, C70, C60-C70.**  
Научный руководитель: Беленков Е. А., д.ф-м.н.  
E-mail: [pitja@74.ru](mailto:pitja@74.ru) стр. 120

Полянский Дмитрий Александрович, вед. инженер  
Дальневосточный Государственный Университет, физико-технический  
**Статистическое исследование квазикристаллических симметрий в древесно-графовом представлении**  
Научный руководитель: Юдин Виталий Витальевич, д.ф-м.н.  
E-mail: [rambo192@mail.ru](mailto:rambo192@mail.ru) стр. 122

Попко Евгений Александрович, 5 курс  
Уральский Государственный Технический Университет (УПИ), физико-технический  
**Моделирование кривых термовысвечивания с использованием различных соотношений между микропараметрами центров захвата и рекомбинации**  
Научный руководитель: Вайнштейн Илья Александрович, к.ф-м.н.  
E-mail: [dtdk@mail.ru](mailto:dtdk@mail.ru) стр. 123

Пуханова Ирина Викторовна, 5 курс  
Тульский Государственный Университет, естественно-научный  
**Оценка состояния материала путем комплексного анализа**  
Научный руководитель: Чуканов Александр Николаевич, д.т.н.  
E-mail: [pukhanova@ramdler.ru](mailto:pukhanova@ramdler.ru) стр. 124

Пчелкина Злата Викторовна, м.н.с.  
Институт Физики Металлов УрО РАН, лаборатория оптики металлов  
**Изучение спектральных свойств Sr<sub>2</sub>RuO<sub>4</sub> в рамках LDA+DMFT(QMC) подхода**  
Научный руководитель: Коротин М.А., д.ф-м.н.  
E-mail: [pzv@optics.imp.uran.ru](mailto:pzv@optics.imp.uran.ru) стр. 125

Рахимов Степан Вадимович, аспирант 1 года  
Ростовский Государственный Университет, физический  
**Исследование кислородной подрешетки кристалла YBa<sub>2</sub>Cu<sub>3</sub>O<sub>7</sub> методом каналирования**  
Научный руководитель: Малышевский Вячеслав Сергеевич, д.ф-м.н.  
E-mail: [strakh@forsite.ru](mailto:strakh@forsite.ru) стр. 125

Ребецкий Александр Игоревич, 5 курс  
Тверской Государственный Университет, физико-технический  
**Деполаризующие поля, термоупругие напряжения, смещение точки фазового перехода в кристаллах BaTiO<sub>3</sub>+Nb<sub>5+</sub>, инициированные быстрым изменением их температуры**  
Научный руководитель: Большакова Н.Н., к.ф-м.н.  
E-mail: [rebezky-air@mail.ru](mailto:rebezky-air@mail.ru) стр. 126

Ребецкий Александр Игоревич, 5 курс  
Тверской Государственный Университет, физико-технический  
**Влияние механических напряжений на термоиндуцированные процессы перестройки доменной структуры и точку фазового перехода кристаллов BaTiO<sub>3</sub> с примесью Nb<sub>5+</sub>**  
Научный руководитель: Большакова Н.Н., к.ф-м.н.  
E-mail: [rebezky-air@mail.ru](mailto:rebezky-air@mail.ru) стр. 127

Силинин Антон Владимирович, аспирант 2 года  
Кемеровский Государственный Университет, физический  
**Зоны Бриллюэна подрешеток в некоторых кристаллах кубической сингонии**

Научный руководитель: Поплавной Анатолий Степанович, д.ф.-м.н.  
E-mail: [silinin@kemsu.ru](mailto:silinin@kemsu.ru) стр. 129

Сыркин Илья Сергеевич, 6 курс  
Кузбасский Государственный Технический Университет, ММФ  
**Механические свойства неорганических монокристаллических световодов**  
Научный руководитель: Фадеев Юрий Александрович, д.т.н.  
E-mail: [worm256@mail.ru](mailto:worm256@mail.ru) стр. 131

Сыркин Илья Сергеевич, 6 курс  
Кузбасский Государственный Технический Университет, ММФ  
**Исследование взаимодействия адсорбированных молекул на поверхности твердых тел**  
Научный руководитель: Фадеев Юрий Александрович, д.т.н.  
E-mail: [worm256@mail.ru](mailto:worm256@mail.ru) стр. 130

Тихонов Никита Дмитриевич, 6 курс  
Петрозаводский Государственный Университет, физико-технический  
**Влияние слабых постоянных и переменных магнитных полей на кинетику синтеза оксидов тантала и ниобия**  
Научный руководитель: Малиненко В. П., к.ф.-м.н.  
E-mail: [nik-1982@mail.ru](mailto:nik-1982@mail.ru) стр. 132

Тихонова Татьяна Александровна, 5 курс  
Кузбасская Государственная Педагогическая Академия, физико-математический  
**Модель выпрыгивания краевой дислокации на свободную поверхность**  
Научный руководитель: Неверов Валерий Владимирович, д.ф.-м.н.  
E-mail: [tat-82@mail.ru](mailto:tat-82@mail.ru) стр. 133

Федоров Игорь Александрович, аспирант  
Кемеровский Государственный Университет, физический  
**Электронная структура карбоната лития**  
Научный руководитель: Журавлев Ю.Н., д.ф.-м.н.  
E-mail: [f992fia@ic.kemsu.ru](mailto:f992fia@ic.kemsu.ru) стр. 134

Ханин Даниил Владимирович, аспирант  
Институт Физики Прочности и Материаловедения СО РАН, лаборатория теории неравновесных состояний  
**Исследование спин-орбитального расщепления в полупроводниковых соединениях III-V группы**  
Научный руководитель: Кулькова Светлана Евгеньевна, д.ф.-м.н.  
E-mail: [daniil@phys.tsu.ru](mailto:daniil@phys.tsu.ru) стр. 135

Червонцева Евгения Александровна, аспирант  
Уральский Государственный Технический Университет (УПИ), физико-технический  
**Морфологическая устойчивость двумерного цилиндрического кристалла при линейной и квадратичной зависимостях локальной скорости роста от пересыщения**  
Научный руководитель: Мартюшев Леонид Михайлович, к.ф.-м.н.  
E-mail: [Chervontseva@rambler.ru](mailto:Chervontseva@rambler.ru) стр. 136

Яковлев Роман Александрович, инженер  
Петрозаводский Государственный Университет, физико-технический  
**Разделение влияния поверхностной неоднородности и заглупления электрически активных состояний на кривые нормированной проводимости в структурах металл-диэлектрик-полупроводник**  
E-mail: [romnd@mail.ru](mailto:romnd@mail.ru) стр. 137

Ярцев Андрей Викторович, аспирант 3 года  
Новосибирский Государственный Университет, физический  
**Моделирование темного тока фотодиодов на основе CdHgTe**  
Научный руководитель: Овсяк Виктор Николаевич, д.ф.-м.н.  
E-mail: [jartsev@ngs.ru](mailto:jartsev@ngs.ru) стр. 139

## Особенности получения пленок $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$ методом магнетронного распыления

*Алимагомедов Якуб Альбертович*

*Гусейнов Марат Керимханович*

*Дагестанский Государственный Университет*

*Билалов Билал Аругович, д.ф.-м.н.*

*[alimagomedov\\_yak@mail.ru](mailto:alimagomedov_yak@mail.ru)*

В настоящее время для получения твердых растворов  $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$  в основном применяют методы сублимации жидкофазной эпитаксии. Эти методы обладают рядом недостатков связанные с технологическими трудностями и не позволяют получать однородные слои толщиной десятки тысяч ангстрем.

В данной работе представлена технология получения пленок  $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$  методом магнетронного распыления.

Для получения плёнок  $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$  использовались вакуумная установка УМР-3, модернизированная для магнетронного осаждения пленок. Распыление проводилось магнетронном планарного типа, охлаждаемого проточной водой. Для получения разряда использовался источник питания со стабилизацией тока "Statron 4205". Для регулирования и поддержания температуры подложки стабильной применялась автоматическая система высокочастотного регулирования температуры ВРТ-3ю.

В качестве мишеней использовались поликристаллические пластины твердого раствора SiC-AlN с размерами  $h=3\text{мм}$ ,  $d=100\text{мм}$ .

В качестве подложек, в основном, использовались сапфир и монокристаллический карбид кремния политипа 6Н (0001), выращенные методом Лели. Все использованные нами подложки карбида кремния были n-типа проводимости с  $N_d-N_a=(6 \cdot 10^{17} \pm 3 \cdot 10^{18} \text{см}^{-3})$ . Для оптических исследований в ультрафиолетовом диапазоне длин волн пленки  $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$  получали на подложках (0001).

Типичные режимы осаждения пленок  $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$  методом магнетронного распыления представлены в таблице.

1. Остаточное давление в системе, Па	$10^{-3}$
2. Рабочий газ	Ar
3. Давление рабочего газа, Па	11-0.1
4. Ток разряда, мА	20-100
5. Расстояние мишень- подложка, мм	35-50
6. Скорость осаждения, нм/с	0.1-0.7
7. Температура подложки, К	800-1300
8. Максимальная длительность рабочего цикла ч.	1-3

Исследование процессов ионного распыления поликристаллических мишеней SiC-AlN позволило установить, что параметры процессов распыления зависят от состава мишеней. Обнаружено, что скорость распыления мишеней SiC-AlN уменьшается с увеличением содержания AlN.

Исследования зависимости скорости роста от температуры подложки при фиксированных других параметрах показали, что скорость осаждения строго зависит от температуры подложки. Для данного значения тока с увеличением температуры подложки от 800 до 1300К скорость роста пленок  $(\text{SiC})_{1-x}(\text{AlN})_x$  уменьшается в 5-6 раз. Причину установленной зависимости можно связать с основным механизмом роста кристаллов. Такой подход позволяет использовать теорию скоростей конденсации из пересыщенного пара, которая предсказывает, что относительная скорость конденсации является весьма чувствительной функцией температуры системы. Так как пересыщение уменьшается при увеличении температуры, число стабильных зародышей также уменьшается.

## Моделирование новой трехмерно связанной структурной разновидности углеродных материалов

*Али-Паши Виталий Альбертович*

*Челябинский Государственный Университет*

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

*[belenkov@cgu.chel.su](mailto:belenkov@cgu.chel.su)*

При нормальных условиях графит является самой термодинамически устойчивой структурной модификацией углерода. В графите атомы находятся в  $sp^2$  гибридном состоянии и образуют слоевую структуру. Кроме того,  $sp^2$  гибридные атомы могут образовывать каркасные структуры, получающиеся при сворачивании слоев графита (нанотрубки и фуллерены). В слоях атомы углерода связаны прочными жесткими ковалентными связями, между собой слои или каркасные структуры (фуллерены и



нанотрубки) связываются слабым Ван-дер-Ваальсовским взаимодействием. Это обуславливает сильную анизотропию свойств графита и углеродных конденсатов, что препятствует их использованию в качестве конструкционного материала, из-за низких прочностных свойств в направлении перпендикулярном плоскости графитовых слоев. С другой стороны ковалентные связи между углеродными атомами в слоях имеют порядок 1,333 и их прочность выше прочности одинарных углерод-углеродных связей в алмазе. Следовательно, теоретически возможно создание материала более прочного, чем алмаз. Для этого необходимо, чтобы ковалентные связи между  $sp^2$  гибридизированными атомами были не только слоевыми, а образовывали трехмерно связанную жесткую объемную структуру. Какой должна быть структура этого материала можно определить в результате компьютерного моделирования, что и составило цель данной работы.

Моделирование проводилось методами молекулярной механики ММ2 и ММ+ при помощи программ ChemOffice и HyperChem. Варьируя положение атомов составляющих рассчитываемые структуры, находили такое их взаимное положение, при котором полная энергия взаимодействия минимальна. В качестве компонент полной энергии взаимодействия рассчитывали энергию деформации связей, энергию скручивания и изгиба связей, энергию кулоновского взаимодействия, энергию диполь-дипольного взаимодействия, энергию Ван-дер-Ваальсовских взаимодействий (близко и дальнедействующих), а так же энергию диполь-зарядового взаимодействия.

В качестве модели для расчетов было принято, что все атомы углерода в структуре должны образовывать по 3 прочных ковалентных связи с соседними атомами и углы между связями должны быть близкими к 120 градусам (т.е. находится в состоянии близком к состоянию  $sp^2$  гибридизации). Трехмерные жестко связанные структуры собирались путем “сшивки” углеводородных молекул. Так как, моделирование структур бесконечного размера невозможно, расчет выполнялся для фрагментов новых структур содержащих от 4 до 8 элементарных ячеек, граничные условия моделировались путем компенсации оборванных связей атомами водорода.

В результате расчетов были найдены различные трехмерно связанные структуры состоящих из углеродных атомов. Всего было рассчитано 29 структурных типов, которые можно разбить на 2 основных класса. Кроме того, возможно существование еще большего числа таких структурных разновидностей. Отличие между ними заключается в количестве атомов в элементарной ячейке, в ориентации углерод-углеродных связей и частоте чередования повторяющихся структурных мотивов. Минимальная элементарная ячейка таких структур содержит 18 атомов. Максимальная элементарная ячейка, для рассчитанных структур, содержит 146 атомов. Элементарные ячейки всех рассчитанных новых углеродных структур относятся к гексагональной сингонии.

Удельная энергия сублимации найденных структур меньше чем для графита, поэтому их формирование при нормальных условиях будет затруднено. Возможным путем синтеза рассчитанных структур, может быть процесс полимеризации углеводородных молекул. Причем исходные углеводородные молекулы должны иметь структуру, близкую к структурному мотиву, в результате периодического повторения которого получается трехмерно связанный материал из  $sp^2$  гибридизированных углеродных атомов.

Таким образом, в результате модельных расчетов установлена возможность устойчивого существования ряда трехмерно связанных углеродных структур, состоящих из атомов углерода в состоянии  $sp^2$  гибридизации. Эти гипотетические структуры должны обладать прочностными характеристиками, превосходящими таковые для алмаза, являющегося на сегодня материалом с предельным значением твердости. Предварительные оценки электрических свойств рассчитанных структур показывают, что они могут быть проводниками.

## **Влияние нарушения регулярного гофрированного порядка расположения сдвигов на упругую энергию системы**

*Антоненко Анастасия Николаевна*

*Неверов Валерий Владимирович*

*Кубасская Государственная Педагогическая Академия*

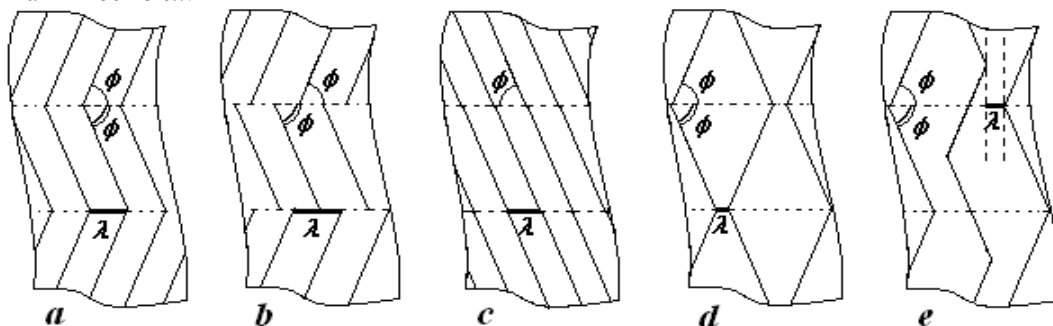
*Неверов Валерий Владимирович, д. ф.-м. н.*

*[aman@nvkz.kuzbass.net](mailto:aman@nvkz.kuzbass.net)*

В работе была произведена оценка энергетической выгоды различных конфигураций незавершенных сдвигов (НС). НС называли участок плоскости сдвига, на котором сдвиговые смещения больше, чем на соседних участках, где смещения считаются упругими [1]. В этом определении не указан механизм сдвига. Сдвиг может быть создан движением дислокаций, мартенситной пластиной, двойником и т.д.

Для каждого отдельного НС принималось поле напряжений, полученное решением упругой задачи для бесконечной плоскости с линейным разрезом, на краях которого действуют постоянные напряжения. Компоненты тензора напряжения и вектора смещения точек тела вычисляли через два комплексных потенциала Колосова-Мусхелишвили [2].

Рассмотренные конфигурации изображены на *рис.1*. Концевые точки участков соседних полос либо совмещены (конфигурации *a, c, d, e*), либо смещены по оси  $0x$  на  $\lambda/2$  (конфигурация *b*). Величиной  $-\lambda$  задавали расстояние между параллельными участками для конфигураций *a, b, c*, а также расстояние между линиями на которых лежат полюсы соседних цепочек (конфигурации *d, e*). Ориентацию участков НС задавали углом  $\varphi$  между участками и осью  $0x$ .



*рис.1* Схемы расположения участков сдвигов.

Принималось, что системы сдвигов находится в объеме с однородным полем сжатия вдоль оси  $0y$ . Деформация вдоль осей  $0x$  и  $0z$  сдерживается:

$$\varepsilon_{zz} = \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xx} = 0$$

Для определения поля напряжений всей группы НС использовали метод Михлина решения задачи Дирихле для многосвязной области [3].

Подробно методика и результаты расчета для конфигурации представляющей гофрированный порядок расположения участков сдвига (*рис.1a*) изложены в публикации [4].

При выборе именно данных групп НС учитывали некоторые условия.

1. Расстояние между параллельными сдвигами не должно быть меньше  $1/4$  длины НС, в противном случае нельзя пренебрегать взаимным влиянием соседних участков друг на друга [4], по этой же причине участки не должны пересекаться.
2. Конфигурации должны иметь то или иное периодическое расположение участков сдвига.

В случае когда взаимным влиянием полей различных НС можно пренебречь, поле группы находили как сумму полей всех сдвигов составляющих конфигурацию:

$$\sigma_{ij} = \sum \sigma_{ij\text{НС}}$$

Выигрыш упругой энергии в результате образования систем сдвигов вычисляли по формуле

$$\Delta E = [E_{\text{упр1}} - (E_{\text{НС}} + A)] / E_{\text{упр1}}$$

где  $E_{\text{упр1}}$  – энергия исходного однородного упругого поля сжатия,  $E_{\text{НС}}$  – энергия упругого поля после образования группы НС,  $A$  – энергия, затраченная на работу по преодолению сопротивления сдвигу на участках НС. Очевидно, что вероятность образования группы тем больше, чем сильнее неравенство  $\Delta E > 0$ .

Данные об энергетической выгодности и интервалах углов, на которые приходится максимум  $\Delta E$ , рассмотренных конфигураций помещены в таблице. Наиболее выгодными конфигурациями оказались (по мере убывания выгодности) *a, b, c* (*рис.1*).

конфигурация	$\lambda=1/4$ длины НС		$\lambda=1/2$ длины НС
	<i>a</i>	$\theta=15^\circ-25^\circ$ $\Delta E=65\%-73\%$	$\theta=55^\circ-70^\circ$ $\Delta E=60\%-73\%$
<i>b</i>	$\theta=15^\circ-22^\circ$ $\Delta E=65\%-70\%$	$\theta=57^\circ-67^\circ$ $\Delta E=65\%-70\%$	$\theta=35^\circ-50^\circ$ $\Delta E=60\%-62\%$
<i>c</i>	$\theta=24^\circ$ $\Delta E=32\%$	$\theta=57^\circ-67^\circ$ $\Delta E=65\%-71\%$	$\theta=55^\circ-65^\circ$ $\Delta E=57\%-60\%$
<i>d</i>	$\theta=30^\circ-50^\circ$ $\Delta E=30\%-32\%$		$\theta=30^\circ-55^\circ$ $\Delta E=25\%-28\%$
<i>e</i>	$\theta=30^\circ-50^\circ$ $\Delta E=30\%-32\%$		$\theta=30^\circ-55^\circ$ $\Delta E=25\%-28\%$

Список публикаций:

- [1] Неверов В.В. Поле напряжений незавершенного сдвига и комбинации незавершенных сдвигов, обусловленные упругим взаимодействием // ПМТФ. 1998. Т. 39. №2. С. 156- 163.
- [2] Мухелишвили Н.И. Некоторые основные задачи математической теории упругости. М.: Наука, 1966. С. 708.
- [3] Михлин С.Г. Интегральные уравнения. Приложения интегральных уравнений к некоторым проблемам механики, математической физики и техники. М.-Л., ОГИЗ ГИТТЛ. 1947. 304 с.
- [4] Неверов В.В. Антоненко А.Н. Упругие напряжения при пластическом гофрировании слоев материала. Касательные напряжения. // Физика металлов и металловедение, 2004, т. 98, № 1 С. 5-13.

## Особенности решения упругой задачи для плоскости с разрезом без стопоров на краях разреза.

Антоненко Александр Иванович

Кузбасская Государственная Педагогическая Академия

[aliv@nvkz.kuzbass.net](mailto:aliv@nvkz.kuzbass.net)

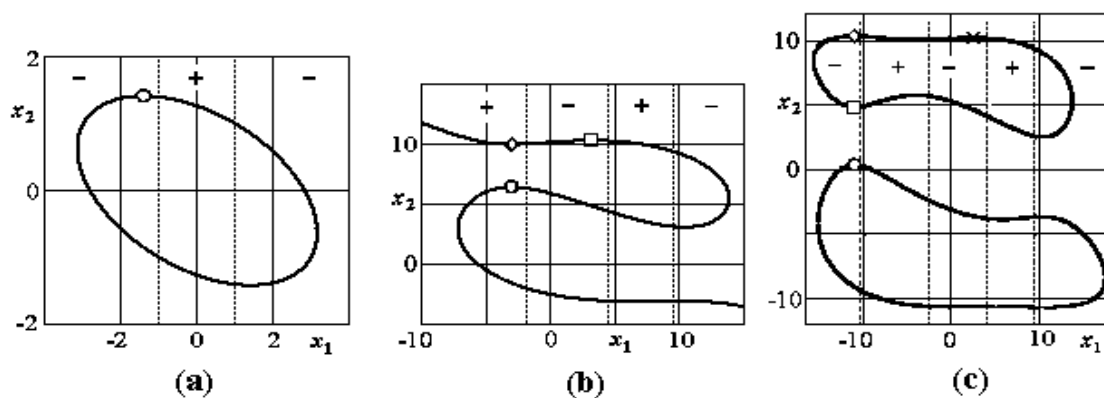
Упругое поле пластических сдвигов находят путем решения упругой задачи для однородной упругой плоскости с линейным разрезом [1]. Смещение по разрезу представляет пластический сдвиг. В общем случае, это решение дает на концах участка сдвига полюса. Физически полюса представляют узкие стопора с бесконечно высоким сопротивлением сдвигу. Положения полюсов-стопоров устанавливают до решения упругих задач, включая их в граничные условия упругой задачи. Хотя положения стопоров устанавливаются в соответствии с имеющимися физическими соображениями, в значительной степени этот выбор произволен.

В работах [2 – 4] описан новый метод решения упругой задачи для бесконечной плоскости с разрезом без полюсов на краях разреза. Положения концов участка сдвига на начало решения не определены, поэтому роль граничного условия для решения упругой задачи теперь выполняет функция, описывающая распределение активного касательного напряжения  $\tau_{act}(x)$  в плоскости сдвига. Функция распределения активного касательного напряжения задается полиномами от второй степени и выше. Условие отсутствия полюсов записывается в виде равенства нулю гидростатического давления в концевых точках участка сдвига:

$$P(x,0)|_{x_1, x_2} = 0 \quad (1)$$

При этом решается система двух уравнений степени, соответствующей степени полинома  $\tau_{act}(x)$ .

Определение концов участка сдвига сильно упрощается, если решать только одно из уравнений (1). На рисунке показаны зависимости положений  $x_2(x_1)$  для функций  $\tau_{act}(x)$ , заданных полиномами 2-й (a), 3-й (b) и 3-й (c) степеней. При этом положения концов участка сдвига, в которых нет полюса, соответствуют экстремумам  $x_2(x_1)$  – они на рисунке показаны кругом, квадратом, ромбом и крестом. Знаками «+» и «-» обозначены значения функций  $\tau_{act}(x)$  в плоскости сдвига. Для всех остальных точек кривых  $x_2(x_1)$  решение упругой задачи будет давать в точках  $x_1$  полюс.



Список публикаций:

- [1] Мухелишвили Н.И. Некоторые основные задачи математической теории упругости. – М.: Наука, 1966. – 707 с.
- [2] Неверов В.В., Антоненко А.И., Молотков С.Г. Модели скачкообразного развития сдвигов. // Физическая мезомеханика. Т.5. №6, 2002. С. 43–48.
- [3] Неверов В.В., Антоненко А.И. Превращения энергии при скачкообразном развитии пластического сдвига. // Физическая мезомеханика. Т.7. №3, 2004. С. 43–52.
- [4] Антоненко А.И., Неверов В.В. Континуальное описание скачкообразного развития сдвигов. // Физическая мезомеханика. Т.7. Спец. выпуск, Ч.1., 2004. С. 192–195.

## Влияние условий сенсibilизации на эффективность фотопроецесса гексагональных плоских микрокристаллов AgBr

*Афонькина Юлия Николаевна*

*Сотникова Лариса Владимировна, Безъязычная Марина Алексеевна*

*Кемеровский Государственный Университет*

*Сечкарев Борис Алексеевич, д.х.н.*

*[sechkar@kemsu.ru](mailto:sechkar@kemsu.ru)*

Согласно принципу однородности К.С. Богомолова [1], оптимальные фотографические характеристики достигаются для светочувствительных систем, содержащих кристаллографически и гранулометрически однородные микрокристаллы AgHal. В последствие этот принцип был экспериментально подтвержден и дополнен необходимой однородностью внутренней структуры, состава и распределения примесей. Для достижения высокой светочувствительности на галогенсеребряных системах, усилия производителей фотоматериалов были направлены на получение однородных плоских кристаллов (Т-кристаллов) шестиугольной формы.

Мы исследовали внутреннее строение модельных плоских Т-кристаллов размером 5 мкм методом медленного растворения. На рисунке 1 приведены внешний вид Т-кристаллов используемых для эксперимента и формы кристаллов полученных после растворения. Все представленные кристаллы принадлежат одной популяции полученной в одних условиях и подвергнутых растворению в равной степени.

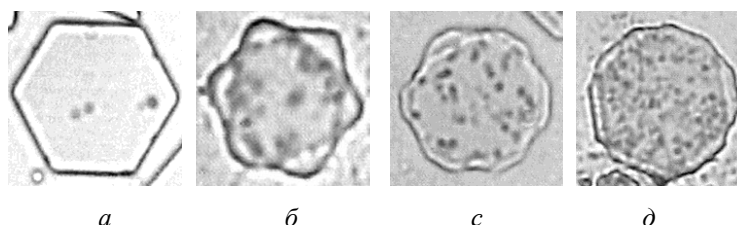


рис.1 Фотографии Т-кристаллов (а) и Т-кристаллов после растворения (б, с, д)

Из рисунка видно, что Т-кристаллы, имевшие первоначально одинаковую шестиугольную форму, в процессе травления превращаются в фигуры различного вида. У одних кристаллов растворяются углы (с, д), а у других ребра (б).

Известно, что химическая сенсibilизация (ХС) Т-кристаллов AgBr ведёт к неселективному образованию центров светочувствительности и скрытого изображения, большая часть которых случайно распределена по главным поверхностям, углам и ребрам. Возможным объяснением этого факта является обнаруженное нами различие во внутреннем строении Т-кристаллов. Сенсibilизатор фотографических эмульсий –  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ , одновременно являющийся и растворителем кристаллов AgBr, будет взаимодействовать с наиболее реакционноспособными участками Т-кристалла, создавая центры светочувствительности у одних кристаллов (б) на ребрах, а у других на углах (с, д). Присутствие в одной популяции внешне одинаковых кристаллов AgBr, но с разным внутренним строением приводит к формированию Т-кристаллов неоднородных по фотографическим свойствам.

Для исследования фотографических свойств нами была синтезирована "Ядровая эмульсия" (эмульсия 1), содержащая Т-кристаллы со средним эквивалентным диаметром  $d = 0,9$  мкм и  $C_v = 40\%$ , методом двухструйной кристаллизацией с использованием перемешивающего устройства [2], обеспечивающего интенсивное смешение в точке подачи реагентов. Далее были получены 3 эмульсии, которые отличались величиной рВг перед кристаллизацией оболочки (эмульсия 2 – рВг = 1,5, эмульсия 3 – рВг = 2, эмульсия 4 – рВг = 2,5). После этого фотоэмульсии подвергали в одинаковых условиях сернисто-золотой и сернисто-золотой ХС с роданидом калия и использовали для получения фотослоев. Далее были получены сенситометрические характеристики для всех эмульсионных слоев. Было обнаружено, что добавление роданида калия при ХС приводит к значительному увеличению сенситометрических характеристик. Анализируя полученные данные и согласно [3], для улучшения фотографических характеристик была проведена спектральная сенсibilизация (СС) эмульсии 2. Спектральную сенсibilизацию проводили после химической сенсibilизации с оптимальными концентрациями химических сенсibilизаторов. Выбор красителей был обусловлен литературными данными по изучению адсорбции красителей на различных типах поверхности микрокристаллов AgBr. Следует заметить, что СС привела к увеличению общей светочувствительности фотослоя почти в четыре раза по сравнению со светочувствительностью несенсibilизированного фотослоя. Сенситометрические характеристики и условия проведения химических сенсibilизаций фотографических эмульсий представлены в таблице:

№ ЭМУЛЬСИИ	S <sub>0,85</sub>	S <sub>0,2</sub>	D <sub>0</sub>	D <sub>max</sub>	[Na <sub>2</sub> S <sub>2</sub> O <sub>3</sub> ]x10 <sup>-5</sup> МОЛЬ/МОЛЬAg	[KSCN]x 10 <sup>-3</sup> МОЛЬ/МОЛЬAg	[HAuCl <sub>4</sub> ]x10 <sup>-5</sup> МОЛЬ/МОЛЬAg
1	18	9	0,02	3,7	5,6	-	1,9
	35	16	0,05	4,1	5,6	2,4	1,9
2	20	11	0,06	3,8	5,6	-	1,9
	50	26	0,09	4,8	5,6	2,4	1,9
3	13	7	0,04	3,5	5,6	-	1,9
	40	18	0,07	4,5	5,6	2,4	1,9
4	8	4	0,03	3,1	5,6	-	1,9
	35	11	0,06	4,1	5,6	2,4	1,9

Полученные экспериментальные данные о взаимосвязи между формой кристалла и их фотографическими свойствами представляется актуальной задачей разработки методики синтеза фотоэмульсионных кристаллов, содержащих однородные не только по форме, но также и по внутренней структуре плоские микрокристаллы AgHal с эффективным концентрированием фотолитического серебра.

Список публикаций:

[1] Богомолов К.С., *Научн. Труды ГОСНИИХИМФОТОпроект, т.2, 7 (1957)*

[2] *US pat. 3.782.954. Eastman Kodak Company, (1974).*

[3] Л.В. Сотникова, Б.А. Сечкарев, Ю.Н. Афонькина, М.А. Безъязычная, Ф.В. Титов "Фотографические свойства микрокристаллов AgBr(I)", *Ползуновский вестник № 4, 62-68 (2004).*

## Пассивация гетероструктур HgCdTe/CdTe/ZnTe/Si слоями CdTe

*Бабенко Александр Александрович*

*Новосибирский Государственный Университет*

*Якушев Максим Витальевич, к.ф.-м.н.*

*shurick@sibmail.ru*

Фундаментальные физические свойства HgCdTe (КРТ) обуславливают его широкое использование в качестве материала для изготовления инфракрасных детекторов в области длинных (8-12мкм) и средних (3-5 мкм) длин волн. Одной из проблем, ухудшающих характеристики ИК детекторов является высокий темп поверхностной рекомбинации через уровни, расположенные в запрещённой зоне вблизи поверхности плёнки и прочие эффекты, такие, как изгиб зон в КРТ, связанные со свойствами поверхности. Пассивация плёнок КРТ различными методами необходима для того, чтобы избавиться от эффектов, связанных с поверхностью или существенно уменьшить их влияние на электрофизику приборов.

В работе исследуются электрофизические параметры гетероструктур Hg<sub>1-x</sub>Cd<sub>x</sub>Te/CdTe/ZnTe/Si (x=0,23) с варизонным слоем на поверхности, поверх которых после остывания плёнки КРТ был нанесён тонкий (~ 50 ангстрем) слой Te. Гетероструктуры выращены методом молекулярно-лучевой эпитаксии в установке «Обь» в лаб. 15 ИФП СО РАН. Исследованы временные и спектральные зависимости фотопроводимости структур с нанесённым слоем Te и без такого слоя при температуре 77 К. Получены следующие результаты:

• В структурах, пассивированных Te в зависимостях релаксации фотопроводимости есть две составляющих. Это может свидетельствовать о том, что существуют два различных типа центров рекомбинации с различными временами рекомбинации. В структурах без пассивирующего слоя таких двух типов центров рекомбинации нет и у носителей наблюдается одно время жизни (Рис. 1).

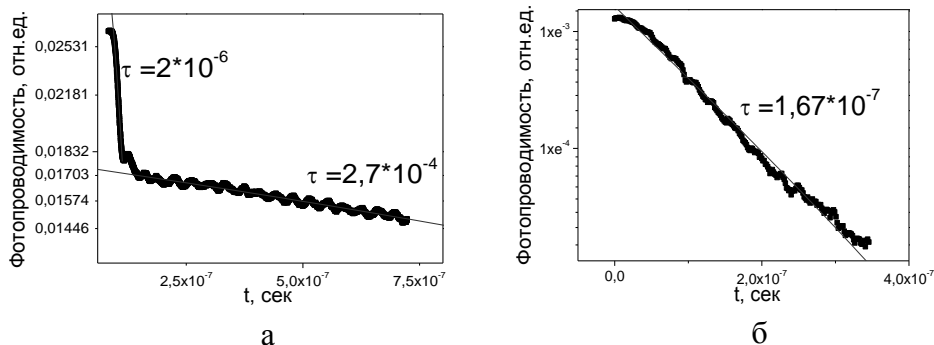


рис.1. Зависимость фотопроводимости от времени в HgCdTe а) с нанесённой поверх плёнкой Te, б) без плёнки

- В структурах, пассивированных Те наблюдается пик фотопроводимости в коротковолновой области спектра. В длинноволновых областях вид спектральной зависимости фотопроводимости при нанесении Те не меняется.

- Таким образом, можно сделать вывод о том, что в приповерхностном слое образуется широкозонный участок, обогащённый дырками с большим временем жизни и обеднённый электронами.

## Исследование атомной структуры силикатных стекол с различным процентным содержанием железа методом рентгеновской спектроскопии поглощения

*Баранников Иван Борисович*

*Ростовский Государственный Университет*

*Яловега Галина Эдуардовна к.ф.-м.н.*

*[yalovega@ctsnet.ru](mailto:yalovega@ctsnet.ru)*

Методом полного многократного рассеяния был проведен теоретический анализ рентгеновских спектров поглощения силикатных стекол (71.9% SiO<sub>2</sub>, 13.3% Na<sub>2</sub>O, 4.2% MgO, 0.6% Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 0.3% K<sub>2</sub>O, 0.01% BaO, 0.08% TiO<sub>2</sub>, 0.15% SO<sub>3</sub>, 8.7% CaO) за K-краем Fe. Были исследованы стекла с различной концентрацией железа, а именно 1.8%, 0.865% и 0.13% Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Известно, что железо в силикатном стекле может существовать как в двухвалентном, так и в трехвалентном состоянии. Локальное окружение каждого из этих валентных состояний может реализоваться как в виде тетраэдра, так и в виде октаэдра. Целью настоящей работы было определение локального окружения железа в исследуемых силикатных стеклах как функции концентрации железа. Для этого, были построены модели возможных кластеров, с расстояниями Fe-O, соответствующими двухвалентному и трехвалентному железу и для этих моделей рассчитаны теоретические спектры рентгеновского поглощения за K-краем железа. Для сопоставления с экспериментом использовались различные линейные комбинации этих спектров. В результате было получено хорошее согласие теоретических спектров с экспериментом (рис.1).

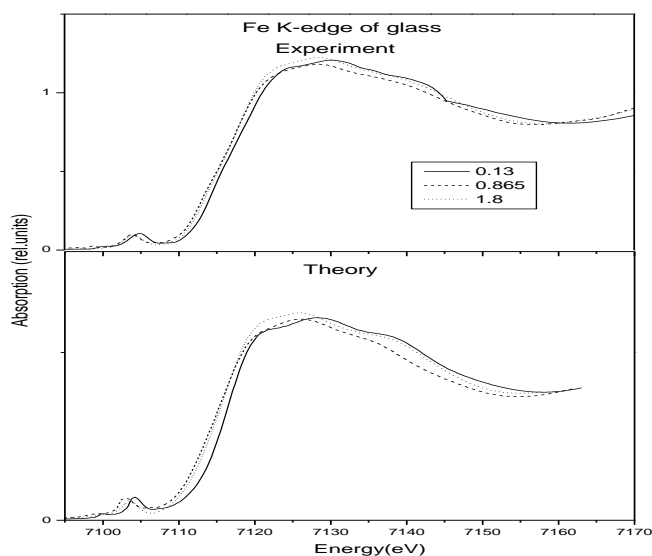


рис.1

## Определение проницаемости проппанта с синтетическими волокнами

*Безиков Алексей Александрович*

*Тюменский Государственный Университет*

*Семихин Виталий Иванович*

*[nemoalex@rambler.ru](mailto:nemoalex@rambler.ru)*

Основная причина снижения эффекта от гидроразрыва пласта (ГРП) – вынос проппанта в скважину. Компания Schlumberger предлагает метод армирования проппанта в трещине полимерными волокнами. Но наличие полимерных волокон в трещине сказывается на ее проницаемости.

Для выявления влияния волокон полимера на проницаемость проппанта была создана экспериментальная установка (рис. 1). Статические и динамические характеристики установки максимально

приближены к пластовым (применение двухстороннего бокового обжима различной величины, высокие скорости фильтрации).

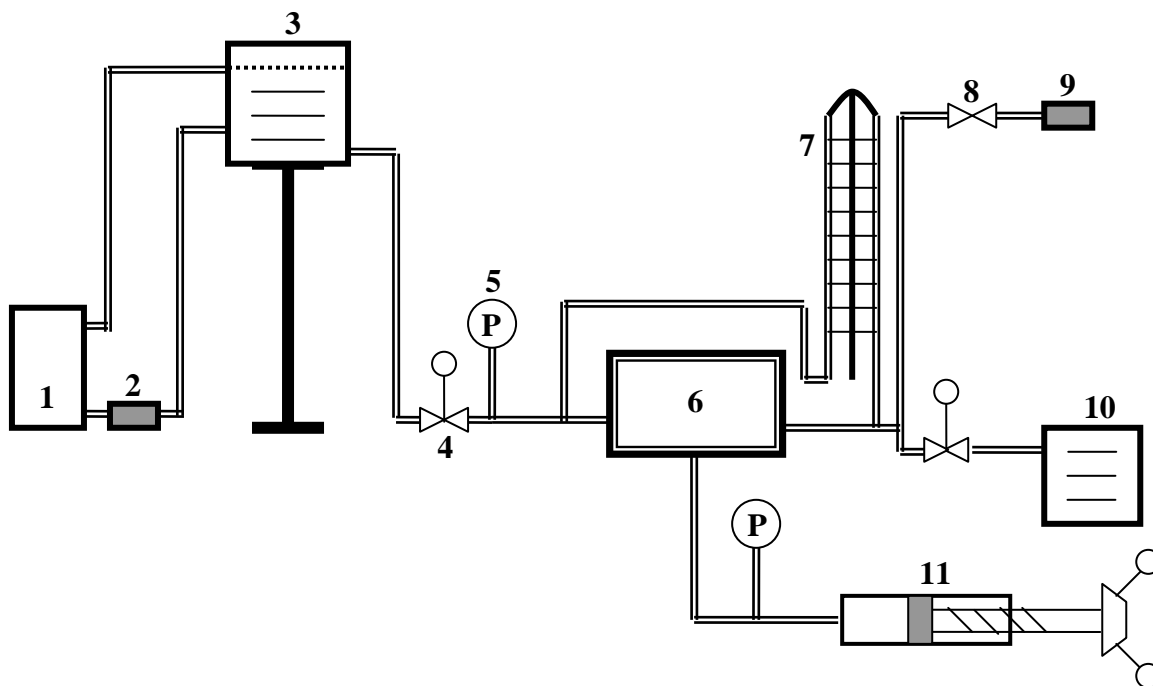


рис. 1

Принципиальная схема экспериментальной установки.

1- резервуар, 2-насос, 3-резервуар (гидростатическое давление), 4-вентиль, 5-манометр, 6-измерительная ячейка, 7-дифференциальный U-образный манометр, 8-запорный вентиль, 9-вакуумный насос, 10-мерный сосуд, 11-гидравлический пресс.

При анализе фильтрационных процессов в работе использовались законы Дарси (1) и Форшгеймера (2) для однородной жидкости:

$$q = m\vec{v} = -\frac{k}{\mu} \text{grad}P \quad (1)$$

$$-\text{grad}P = \frac{\mu}{k} \vec{v} + \beta \rho v^2 \frac{\vec{v}}{|\vec{v}|} \quad (2)$$

В качестве характеристики потока использовалось критическое число Рейнольдса (Re), выражение для которого было предложено Павловским:

$$\text{Re} = \frac{\rho v d_{\text{эфф}}}{\mu(0,95m + 0.23)} \quad (3)$$

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

1. Фильтрационные потоки, реализующиеся в трещинах гидроразрыва пласта и экспериментальной установке, существенно нелинейны.
2. Определён коэффициент проницаемости из уравнения Форшгеймера (2) при различных концентрациях волокон.

# Молекулярно-динамическое моделирование структурных и субструктурных превращений при кристаллизации аморфной пленки Ni на монокристаллической подложке Ag(001)

Березин Михаил Владимирович

Дмитриев Алексей Анатольевич, Евтеев Александр Викторович, Жиликов Дмитрий Геннадьевич

Воронежский Государственный Технический Университет

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

[trash82@inbox.ru](mailto:trash82@inbox.ru)

В данной работе представлены результаты молекулярно-динамического (МД) моделирования структурных и субструктурных превращений при кристаллизации аморфной пленки Ni на монокристаллической подложке Ag(001) в условиях ступенчатого нагрева. Подложка моделировалась с помощью расчетной ячейки, состоящей из 8 атомных слоев, в каждом из которых находилось 900 атомов. В направлениях  $[110]$  и  $[\bar{1}\bar{1}0]$  на систему накладывались периодические граничные условия. Три нижних слоя у дна расчетной ячейки являлись статическими, пять последующих - динамическими. Для формирования аморфной пленки Ni на поверхности подложки случайным образом размещали 9500 атомов. Затем проводилась статическая релаксация (СР) системы. Взаимодействие между атомами описывали с использованием многочастичных потенциалов, рассчитанных в рамках метода погруженного атома. Далее атомам Ni и атомам Ag (в динамических слоях) сообщались скорости в соответствии с распределением Максвелла при температуре 1 К, и производился поэтапный нагрев системы методом МД. Методика МД расчета состояла в численном интегрировании уравнений движения атомов с временным шагом  $\Delta t = 1,5 \times 10^{-15}$  с по алгоритму Верле. После каждого этапа нагрева систему методом СР переводили в состояние с  $T=0$  К, предоставляя возможность атомам занять равновесные положения в локальных потенциальных ямах. Для статически релаксированных моделей рассчитывалась потенциальная энергия ( $U_0$ ) и произведение давления на объем ( $P_0V_0$ ).

В процессе нагрева системы происходит рост кристаллической фазы, образовавшейся на межфазной границе. При температуре около 300 К пленка Ni полностью закристаллизовалась, о чем свидетельствует скачкообразное изменение потенциальной энергии системы. Результаты анализа функции радиального распределения атомов и стереографической проекции основных кристаллографических направлений показали, что основной объем пленки Ni образует ГПУ фазу ориентации  $(11.0), [00.1]$  ГПУ-Ni  $\parallel$  (001),  $[100]$  ГЦК-Ag и лишь около 20% атомов Ni образуют ГЦК фазу параллельной ориентации (см. рис. 1) (здесь 1 и 2 – атомы Ag и Ni в верхнем слое подложки, 3 и 4 – атомы Ni и Ag в первом слое пленки; окружностью выделено место расположения линии частичной дислокации Шокли; пунктирной линией обозначено расположение дефекта упаковки; в выделенном фрагменте показаны атомы, которые образуют параллельную ориентацию).

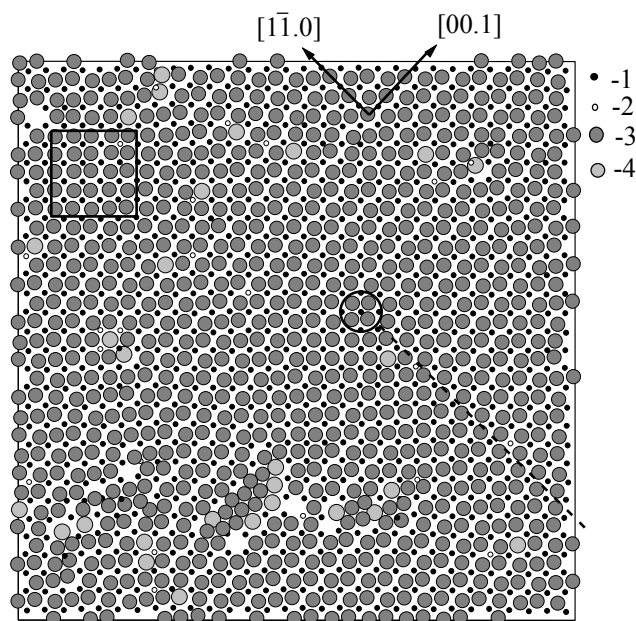


рис. 1

Визуальный анализ параллельных межфазной границе плоскостей показал, что в процессе кристаллизации в пленке Ni образовались дефекты упаковки, лежащие в перпендикулярных межфазной границе плоскостях (00.1), ограниченные частичными дислокациями Шокли с вектором Бюргерса  $\mathbf{b} = a/3[\bar{1}1.0]$  (см. рис. 1).



Таким образом, в процессе ориентированной кристаллизации аморфной пленки Ni на монокристаллической подложке Ag(001) в условиях ступенчатого нагрева сформировалась структура, представляющая собой чередование областей с ГЦК решеткой параллельной ориентации и ГПУ решеткой ориентации (11.0),[00.1] ГПУ-Ni || (001),[100] ГЦК-Ag.

## Рост фрактальных кристаллов в присутствии примеси

*Блинов Олег Александрович*

*Челябинский Государственный Педагогический Университет*

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

*[Blinovoa@74.ru](mailto:Blinovoa@74.ru)*

Дендритные кристаллы находят все большее применение в различных сферах жизни человека. Исследованиями в этой области показано, что ростом фрактальных кристаллов и их свойствами можно управлять, меняя условия роста.

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 вводно-растворимых кристаллах хлористого аммония (NH<sub>4</sub>Cl), используя их в качестве модельных для применения полученных результатов к фрактальным кристаллам и усам меди.

Кристаллы хлористого аммония (NH<sub>4</sub>Cl) имеют фрактальную структуру, а плотность кластера убывает с увеличением радиуса по закону:

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

где  $\rho(r)$  – плотность кластера,  $R_0$  – радиус мономера,  $r$  – 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 плотность кластера убывает с увеличением расстояния от центра, а при  $D = E$ ,  $\rho = \text{const}$ .

Фрактальная размерность кластера изменялась с изменением концентрации примеси (см. табл.). Расчет фрактальной размерности выполнен клеточным методом на PC с помощью моей программы. В своей работе я попытался дать объяснение наблюдаемым фактам.

В работах Саратовкина [3] указывается, что примесь может влиять на изменение габитуса дендритов путем экранирования их поверхности. Но такой механизм не является убедительным, так как не рассматривается влияние примеси на характер дендритных образований: распределение и плотность ветвей, влияние примеси на углы между ветвями, что относится к основным признакам изменения структуры растущего кристалла. К тому же строгий порядок ветвей дендрита не может быть объяснен механическим влиянием примеси.

Для выяснения механизма действия примеси нами использовались образцы раствора NH<sub>4</sub>Cl, к которому добавлялся раствор примеси. Примесь только тогда влияет на процесс кристаллизации, когда образует с основным раствором комплексы.

Первоначально в качестве примеси был выбран карбамид(CO(NH)<sub>2</sub>) (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. Его выбор обусловлен возможностью образования комплексов с исследуемым материалом и наличием в нем двулучепреломления, а также тем, что при его диссоциации в растворе он не дает родственных ионов с основным веществом, что имеет место в случае с мочевиной. Поэтому можно наблюдать за распределением примеси вокруг растущего кристалла под микроскопом в поляризованном свете.

Результаты исследования сводятся к следующему:

1. Отчетливо просматривается дендритный рост кристаллов NH<sub>4</sub>Cl без примеси. Имеются ветви первого и высших порядков с углами между ними  $\sim 89^\circ$ . Видна периодическая субструктура ветвей первого порядка.

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

3. При достижении концентрации примеси  $\sim 0,1 \text{ г/см}^3$  появляются отдельные кристаллики хлорида аммония, покрытые хорошо наблюдаемой в поляризованном свете примесью  $\text{CuSO}_4$ . Без примеси отдельных кристалликов получить практически не удается.

4. 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  $\text{NH}_4\text{Cl}$  проявляет себя в двух видах взаимодействия:

- при высокой концентрации примеси ( $\sim 0,2 \text{ г/см}^3$ ) примесь откладывается на поверхности кристаллов хлорида аммония и экранирует ее рост (механический эффект);
- 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.
- путем изменения условий роста фрактальных кристаллов, можно добиться перехода усов к дендритам, а далее к ограниченным кристаллам.

Список публикаций:

- Блинов О.А. Роль примеси в процессе кристаллизации дендритных кристаллов. М. Сборник тезисов ВНКФ-10, 2004. – 143 с.
- Блинов О.А., Фокин А.В. Формирование дендритных кристаллов  $\text{NH}_4\text{Cl}$
- Саратовкин Д.Д. Дендритная кристаллизация. М.: Государственное научно-техническое издательство по черной и цветной металлургии, 1957. – 127 с.

## Влияние комплексных ионов палладия на каталитическую активность центров скрытого изображения в микрокристаллах $\text{AgBr}$

*Бодак Ксения Александровна*

*Титов Федор Вадимович, Дягилев Денис Владимирович, Владимиров Александр Александрович*

*Кемеровский Государственный Университет*

*Сечкарев Борис Алексеевич, д.х.н.*

[sechkar@kemsu.ru](mailto:sechkar@kemsu.ru)

Несмотря на значительные успехи, достигнутые технологией в области производства галогенсеребряных фотоматериалов, возможности совершенствования таких светочувствительных систем далеко не исчерпаны.

Во многом характеристики фотоматериала определяются эффективностью протекающего в них фотопроцесса. Первой стадией фотопроцесса в  $\text{AgHal}$  является образование проявляемых центров скрытого изображения (ЦСИ). Включение в состав ЦСИ каталитически активных элементов, которым в частности является палладий, безусловно, повлияет на различные стадии фотопроцесса. Введение комплексных соединений  $[\text{PdX}_4]^{2-}$  ( $\text{X} = \text{Br}^-, \text{Cl}^-, \text{NO}_2^-, \text{SO}_3^-, \text{SCN}^-$ ) в МК возможно как на стадии их синтеза, так и на стадии химической сенсibilизации. Настоящая работа посвящена определению условий химической сенсibilизации, позволяющих включать в состав ЦСИ изометрических МК  $\text{AgBr}$  ионы палладия.

В процессе сенсibilизации октаэдрических МК  $\text{AgBr}$  примесные ионы  $[\text{PdX}_4]^{2-}$  вводились после основных сенсibilизаторов ( $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  и  $\text{HAuCl}_4$ ) в концентрациях от  $10^{-3}$  до  $10^{-5}$  моль/моль  $\text{Ag}$ . Зависимость светочувствительности от природы лигандов приведена в таблице:

L <sup>-</sup>	$\text{Br}^-$	$\text{Cl}^-$	$\text{SCN}^-$	$\text{SO}_3^-$
C, mol/mol Ag	$S_{\text{отн}}(C) / S_{\text{отн}}(C = 0)$			
0	1	1	1	1
$10^{-5}$	-	-	1,2	-
$10^{-4}$	0,8	0,4	1,1	1
$10^{-3}$	0,4	0,4	-	0,3

Рост светочувствительности происходит при использовании комплекса с лигандами  $\text{SCN}^-$ , однако уровень оптической плотности вуали при этом значительно возрастает ( $D_0 = 0,9$  и  $0,53$  для концентраций  $10^{-4}$  и  $10^{-5}$  моль/моль  $\text{Ag}$ ) соответственно. Возможно, в данном случае сенсibilизирующее действие оказывают ионы  $\text{SCN}^-$  высвободившиеся из комплекса в результате вторичной диссоциации. Действительно, при введении эквивалентного количества ионов  $\text{SCN}^-$  в процессе сенсibilизации, при прочих равных условиях оптическая плотность вуали соответствует приведенным значениям.

Десенсибилизация в случае введения комплексного иона с лигандами  $\text{Br}^-$  и  $\text{Cl}^-$ , также, скорее всего, вызвана высвобождением дополнительного количества галогенид ионов, которые способны оказывать десенсибилизирующее действие. Значит, если исключить или свести к минимуму процессы вторичной диссоциации комплексных ионов, то возможно реализовать подходы к использованию комплексных соединений палладия в качестве химических сенсibilizаторов.

Известно, что комплексные ионы  $[\text{PdX}_4]^{2-}$  в водном растворе легко подвергаются вторичной диссоциации, что приводит к уменьшению заряда иона. Уменьшить вторичную диссоциацию комплексных ионов возможно добавлением в раствор электролита, содержащего ионы лиганда. Поэтому к раствору комплексного соединения, используемого в процессе химической сенсibilизации, добавлялся электролит с ионами лиганда (фоновый электролит).

$\text{L}^-$	$\text{Br}^-$	$\text{Cl}^-$	$\text{SCN}^-$	$\text{SO}_3^-$
$C, \text{ mol/mol Ag}$	$S_{\text{отн}}(C)/S_{\text{отн}}(C=0)$			
0	1	1	1	1
0,01	1,2	1,1	1,2	0,9
0,1	1,3	1,8	0,88	0,6
1	0,9	3,3	0,7	0,8

В случае  $\text{Br}^-$  лигандов оптимальная концентрация фонового электролита составляет то 0,01 до 0,1 М. Большая концентрация приводит к десенсибилизации, очевидно из-за избытка  $\text{Br}^-$  ионов и их негативного влияния на процесс химической сенсibilизации. Для комплексного соединения с хлоридными лигандами прирост чувствительности наблюдается при концентрации фонового электролита больше 0,1 М. Поскольку устойчивость данного комплекса к вторичной диссоциации минимальна можно предположить, что при концентрациях менее 0,1 М вторичная диссоциация все же протекает. Также можно предположить, что движущей силой каталитического воздействия ионов палладия в данном соединении является процесс замещения хлоридных лигандов на бромидные, протекающий на поверхности МК  $\text{AgHal}$ , что увеличивает вероятность внедрения иона  $\text{Pd}^{2+}$  в примесный центр чувствительности.

Соединение с лигандами  $\text{SCN}^-$  при изменении концентрации фонового электролита снижает чувствительность МК по причине увеличения уровня минимальной оптической плотности. При этом некоторое увеличение при концентрации фона 0,01 М вызвано увеличением количества  $\text{SCN}^-$ , вводимого в реакционную емкость, являющимся, как известно сенсibilizатором МК.

## **Модель процесса геттерирования атомов примесей в кремнии полями упругих напряжений дислокаций**

*Будяков Алексей Витальевич*

*Таганрогский Государственный Радиотехнический Университет*

*Филипенко Наталья Андреевна к.т.н.*

*[29031985@mail.ru](mailto:29031985@mail.ru)*

В настоящее время в связи с особенностями развития микроэлектроники, представляет научный и практический интерес моделирование процесса диффузии атомов примесей переходных металлов в полях упругих напряжений полупроводниковой подложки, источниками которых являются дислокации или их скопления. Данный процесс обуславливает явление геттерирования или дезактивации дислокациями атомов примесей металлов, ухудшающих электрофизические свойства структур, формируемых в кремниевых подложках.

Известно, что диффузия в поле напряжений в одномерном случае описывается уравнением [1]

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} - \nu(x) \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}, \quad (1)$$

где  $C(x,t)$  – концентрация диффундирующих атомов  $\text{м}^{-3}$ ;  $D$  – коэффициент диффузии атомов  $\text{м}^2/\text{с}$ ;  $\nu$  – скорость атомов в поле напряжений,  $\text{м}/\text{с}$ . Согласно [2]  $\nu(x)$  можно выразить через силу  $F(x)$ , действующую на атом в поле упругих напряжений

$$\nu(x) = F(x) \frac{D}{kT}, \quad (2)$$

где  $k$  – постоянная Больцмана, Дж/К;  $T$  – температура, К. По определению силы, действующей в потенциальном поле  $E(x)$ ,  $F(x)$  можно рассчитать

$$F(x) = -\frac{\partial E(x)}{\partial x}. \quad (3)$$

При этом  $E(x)$ , согласно теории упругости, определяется

$$E(x) = \frac{1}{3} \sigma_{ii}(x) \delta V, \quad (4)$$

где  $\sigma_{ii}$  - сумма главных компонент тензора упругих напряжений дислокации или системы дислокаций, Па;  $\delta V$  - активационный объем процесса диффузии, м<sup>3</sup>.

Таким образом, зная закон распределения полей напряжений, создаваемых дислокацией или скоплением дислокаций, можно моделировать процесс диффузии атомов примеси в данных условиях. Нами на основе численного решения уравнения (1), с учетом выражений (2) – (4), проведено моделирование процесса диффузии атомов меди в кремниевой подложке в полях напряжений, создаваемых скоплением дислокаций, неравномерно распределенных в приповерхностном слое подложки. Расчетная величина полей напряжений, соответствующая плотности дислокаций в слое порядка  $10^{12} \text{ м}^{-2}$ , согласно [3], составила  $(4 \cdot 9) \cdot 10^8 \text{ Па}$ , величина скорости - порядка  $10^7 \text{ м/с}$ . Уравнение (1) решалось при следующем начальном

$$C(x,0)|_{x=h} = C_0, \quad (5)$$

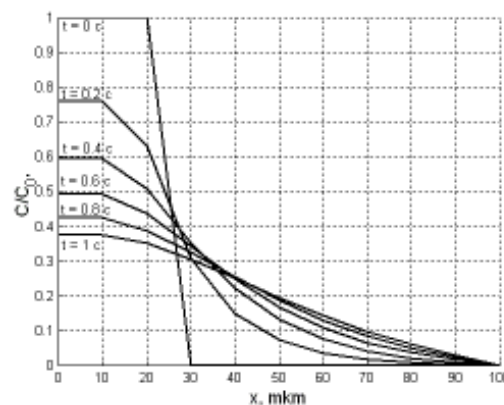
где  $C_0$  – концентрация атомов примеси, распределенных равномерно в слое  $h=10 \text{ мкм}$ , в начальный момент времени; и граничных условиях

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0, \quad (6)$$

$$C(x,t) \Big|_{x=l} = 0, \quad (7)$$

где  $l$  – толщина подложки,  $l=100 \text{ мкм}$ .

Условие (6) задает нулевой поток через поверхность подложки, вблизи которой распределены атомы геттеризируемой примеси, второе условие для противоположной поверхности подложки представляет собой условие связывающей границы. Результаты моделирования в виде графиков нормированного распределения концентрации примеси по толщине пластины в зависимости от времени отжига ( $T=1100 \text{ К}$ ) представлены на рисунке. Видно, что время диффузии атомов меди в поле напряжений слоя дислокаций, в течение которого их концентрация уменьшается 2 раза составляет единицы секунд, что соответствует экспериментальным данным [4]. Таким образом, для геттерирования атомов меди можно рекомендовать использовать быстрый термический отжиг. Представленную модель можно использовать для определения оптимальных значений времени и температуры геттеризирующего отжига атомов других переходных металлов в кремнии и составления рекомендаций по выбору технологического способа реализации процесса геттерирования.



Список публикаций:

- [1] Болтакс Б.И. Диффузия в полупроводниках. - М., 1961, 462с.
- [2] Шьюмон П.. Диффузия в твердых телах. - М., Металлургия, 1966, 195с.
- [3] Масюкевич А.М., Рябошапка К.П., *Металлофизик*, **вып.62**, 3-9 (1975).
- [4] Wong - Leung J., *Phys Rev. A* **59**, №12, 7990-7998 (1999).

## Низкотемпературная электропроводность конгруэнтных кристаллов ниобата лития сильнолегированных окисью магния

**Булычева Анна Александровна**

*Рябцева Мария Александровна, Шишигина Елена Васильевна*

*Томский Политехнический Университет*

*Пичугин Владимир Федорович, д.ф.-м.н.*

[Bulycheva@tpu.ru](mailto:Bulycheva@tpu.ru)

Нелинейные оптические кристаллы ниобата лития ( $\text{LiNbO}_3$ ) являются одним из широко используемых в современной лазерной технике в качестве преобразователей частоты излучения, в разнообразных электро - и акустооптических устройствах, интегральной оптике, для записи оптической информации и т.д. Однако, низкотемпературная область ( $T < 450 \text{ К}$ ) электропроводности кристаллов не изучена, а исследование особенностей процессов электропроводности при этих температурах позволяет выяснить более тонкие детали электрических и оптических свойств  $\text{LiNbO}_3$ . В связи с этим, было предпринято изучение процессов

электропроводности кристаллов  $\text{LiNbO}_3$  в температурной области  $T \sim 80\text{--}450$  К в зависимости от условий их окислительно-восстановительной термообработки.

В работе использовались кристаллы, выращенные методом Чохральского из конгруэнтного расплава с различной концентрацией примеси  $\text{MgO}$  (0-10 Mol%). Было установлено, что электропроводность кристаллов и их оптические свойства обнаруживают сильную зависимость от термообработки в восстановительных условиях, а также от содержания примеси  $\text{MgO}$ . Эффект максимален для чистого LN и уменьшается с ростом содержания  $\text{MgO}$ . Это имеет место как для поверхностной ( $\sigma_s$ ) так и для объемной ( $\sigma_v$ ) проводимости. Величина энергии активации проводимости (как  $\sigma_s$ , так и  $\sigma_v$ ) увеличивается с ростом концентрации  $\text{MgO}$ .

Восстановительный отжиг существенно модифицирует электронный спектр кристаллов LN, что проявляется в характере температурных зависимостей проводимости. Предварительный анализ показал, что в области низких температур следует отдать предпочтение прыжковому механизму. Предполагается, что прыжки электронов осуществляются между локальными уровнями, образованными antisite дефектами, находящимися в различных энергетических состояниях. Легирование кристаллов LN магнием приводит к уменьшению плотности antisite дефектов, что влечет за собой изменение связанных с этими состояниями параметров электропереноса.

Оптическое поглощение восстановленных при 870 К в атмосфере с дефицитом кислорода кристаллов имеет сложный характер и представляет собой суперпозицию элементарных полос гауссовского типа. Результаты показывают, что спектр чистого восстановленного кристалла  $\text{LiNbO}_3$  содержит 4 полосы поглощения с максимумами при 2.3 эВ, 2.9 эВ, 3.3 эВ и 3.48 эВ. Введение примеси  $\text{MgO}$  в различной концентрации принципиально не изменяет наблюдаемого поглощения, однако в дополнение к наблюдаемым в беспримесном  $\text{LiNbO}_3$  полосам появляется новая полоса при 3.7 эВ. Интенсивность полос на 2.3 эВ, 2.9 эВ, 3.3 эВ и 3.48 эВ изменяется незначительно с ростом концентрации  $\text{MgO}$ . Интенсивность полосы при 3.7 эВ, которая наблюдается только лишь в примесных кристаллах, возрастает и достигает максимума в области концентраций  $[\text{Mg}] \sim (5\text{--}6)\text{мол}\%$ . Дальнейшее увеличение концентрации  $\text{MgO}$  приводит к уменьшению полосы при 3.7 эВ, однако даже при концентрации  $[\text{Mg}] = 10\text{мол}\%$  поглощение при 3.7 эВ довольно значительно.

Зависимость поглощения на 3.7 эВ от концентрации  $\text{MgO}$  коррелирует с зависимостью положения края собственного поглощения от содержания  $\text{MgO}$ . Положение этой полосы также соответствует поглощению, наблюдаемому в ионно-облученных кристаллах  $\text{LiNbO}_3 + 10\text{мол}\%\text{MgO}$ , которое идентифицировано как поглощение дефекта замещения  $\text{Mg}_{\text{Nb}}$ . Таким образом, в восстановленных кристаллах  $\text{LiNbO}_3 + 10\text{мол}\%\text{MgO}$  полоса при 3.7 эВ обусловлена присутствием примеси Mg.

Проведенные исследования позволяют сделать следующие выводы:

1. Восстановительный отжиг кристаллов  $\text{LiNbO}_3$  чистых, а также с различным содержанием Mg приводит к увеличению их проводимости ( $10^5\text{--}10^8$ ) раз. Значение  $\sigma_s$  зависит от содержания примеси Mg в кристаллах. С ростом концентрации  $[\text{Mg}]$  эффективность созданий проводящего состояния уменьшается.

2. Обнаружена новая полоса оптического поглощения при  $E_{\text{max}} = 3.7$  эВ, связанная с примесью Mg (центр типа  $\text{Mg}_{\text{Nb}}$ ) в кристаллах  $\text{LiNbO}_3$ .

3. В области низких температур следует отдать предпочтение прыжковому механизму. Прыжки электронов осуществляются между локальными уровнями, образованными antisite дефектами, находящимися в различных энергетических состояниях. Легирование кристаллов LN магнием приводит к уменьшению плотности antisite дефектов, что влечет за собой изменение связанных с этими состояниями параметров электропереноса.

## **Влияние локализованных энергетических состояний в AgHal на эффективность протекания фотопроцесса**

*Владимиров Александр Александрович*

*Титов Федор Вадимович, Дягилев Денис Владимирович, Бодак Ксения Александровна*

*Кемеровский Государственный Университет*

*Сечкарев Борис Алексеевич, д.х.н.*

*[sechkar@kemsu.ru](mailto:sechkar@kemsu.ru)*

Основные свойства носителей зарядов в микрокристаллах (МК) галогенидов серебра, такие, как подвижность, и время жизни в значительной мере определяются локальными энергетическими состояниями в запрещенной зоне, связанные с различными кристаллографическими и примесными центрами.

Нами были проведены эксперименты по введению в МК AgBr кубической и октаэдрической огранки, средним эквивалентным диаметром  $d = 0,5$  мкм, примесных ионов  $[\text{IrCl}_6]^{3-}$ . Примесные ионы вводились на различных стадиях роста МК обеспечивая заданную локализацию в МК. При встраивании иона  $[\text{IrCl}_6]^{3-}$  в запрещенной зоне AgHal образуются локальные энергетические состояния, являющиеся электронными

ловушками глубиной около 0,2 эВ от зоны проводимости. Ионы иридия, встроившиеся в МК, нарушают баланс дефектов Френкеля, поэтому для сохранения электронейтральности по соседству с ионом  $Ir^{3+}$  образуется две вакансии  $Ag_{\square}^{-}$ , которые служат дырочными ловушками глубиной около 0,4 эВ.

Фотопроект в таких МК имеет принципиальное отличие от процесса в обычных МК. Для объяснения действия допирующих ионов иридия необходимо привести дополнительные реакции, протекающие при фотографическом процессе в МК допированном ионами  $[IrCl_6]^{3-}$ .

1. Обратимый захват электрона иридиевым центром:



Захваченный электрон исключается из процесса быстрой рекомбинации.

2. Обратимый захват дырки с образованием V центра:



Движение дырки существенно замедляется, благодаря чему электронно-ионные процессы образования скрытого изображения (СИ) могут завершиться раньше, чем дырка продиффундирует к месту образования центра скрытого изображения (ЦСИ).

В процессе образования ЦСИ принимают участие электроны, временно захваченные иридиевым центром, и исключенные, таким образом, из процессов рекомбинации. В результате регенерации (т.к. реакция 1 обратима) иридиевый центр снова может действовать как электронная ловушка. Замедление процессов рекомбинации приводит к изменению кинетических параметров фотолиза  $AgHal$ , делая предпочтительными процессы образования ЦСИ над процессами электронно-дырочной рекомбинации. Наиболее предпочтительным с точки зрения фотографических свойств местом локализации допанта является подповерхностная область (введение допанта после осаждения 90% кристаллизационной массы).

Нами установлено, что увеличение количества допанта для несенсибилизированных образцов содержащих МК октаэдрической огранки приводит к росту максимальной оптической плотности и не оказывает сколь-либо заметного влияния на чувствительность и оптическую плотность вуали, тогда как при сенсибилизации оптимальной является концентрация  $1 \cdot 10^{-8}$  моль  $Ir^{3+}$ /моль  $Ag$  и  $2 \cdot 10^{-8}$  моль  $Ir^{3+}$ /моль  $Ag$  для МК октаэдрической и кубической огранки соответственно.

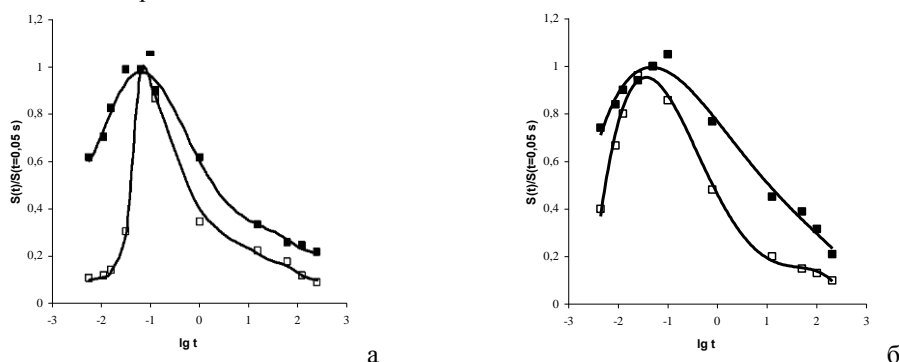


рис. 1. Зависимость относительной светочувствительности от времени экспонирования ( $\square$  – недопированные;  $\blacksquare$  – допированные ионами  $[IrCl_6]^{3-}$ ) МК  $AgBr$ :  
а – октаэдрической огранки; б – кубической огранки

Благодаря временному акцептированию электронов (реакция 1) увеличивается их время жизни в зоне проводимости, и таким образом позволяет растянуть во времени электронную составляющую процесса образования ЦСИ. На (рис. 1) представлены зависимости относительной светочувствительности от времени экспозиции для эмульсионных слоев содержащих кубические и октаэдрические МК  $AgBr$ .

При малых освещенностях эффективность образования ЦСИ увеличивается, предположительно, по причине акцептирования дырок или по крайней мере части их катионными вакансиями, и таким образом, исключение последних из процессов рекомбинации. При этом, возможно, замедление процессов фотолиза влияет на эффективность процессов захвата дырок, тем самым, уменьшая вероятность окисления центров и предцентров СИ молекулярным бромом, что, по мнению Митчела, является главной причиной невыполнения закона взаимозаместимости при больших выдержках.

Следовательно, включение иридия в МК приводит к изменению кинетических параметров фотолиза  $AgHal$ , делая предпочтительными процессы образования ЦСИ над процессами электронно-дырочной рекомбинации и разрушения центров и предцентров СИ, что в свою очередь приводит к увеличению фотографической чувствительности.

# Исследование влияния условий синтеза на сенситометрические характеристики

## эмульсионных МК AgBr (111)

Гаврилова Наталья Владимировна

Некрасова Оксана Юрьевна, Павлова Анна Александровна

Кемеровский государственный университет

Звиденцова Надежда Семеновна, к.х.н.

[natasha-g@list.ru](mailto:natasha-g@list.ru)

В работе проведен анализ экспериментальных результатов по синтезу эмульсионных микрокристаллов (МК) AgBr (111) с использованием различных скоростей подачи реагентов в раствор, рассмотрена взаимосвязь основных характеристик кристаллизационного раствора с процессами кристаллизации, проведена оценка значений величины пересыщения, критического размера зародыша и критической скорости роста МК. В работе [1] обнаружено влияние скорости кристаллизации на ионную проводимость МК AgBr (111). При увеличении скорости роста МК с ростом ионной проводимости эффективность собственного созревания эмульсионных микрокристаллов снижается.

Для определения величины критического пересыщения при используемых скоростях синтеза, в соответствии с выражением, были построены зависимости величины пересыщения  $S-1$  от  $W/nd$  ( $W$  – скорость введения реагентов,  $n$  – число кристаллов,  $d$  – размер кристалла) для нескольких размеров МК AgBr октаэдрического и кубического габитусов при разных скоростях синтеза. На рис. 1 приведены данные для  $d = 0,6$  и  $0,4$  мкм, и  $n = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$  для МК AgBr (111). Для размеров и значений  $n$  в построенной зависимости четко проявляется излом, свидетельствующий о возможности появления зародышей новой популяции МК. Наличие точки перегиба прямо свидетельствует о превышении поступления реагентов в раствор над расходом реагентов даже при скоростях роста выше критической для исходной популяции МК. Координаты точки излома (см. рис. 1) соответствуют значениям  $(S-1)^* = 0,17$  при  $(W/nd)^* = 6,55 \cdot 10^{-9} \text{ моль с}^{-1} \text{ м}^{-1}$ . Тот факт, что при скорости подачи растворов в реактор меньше, чем  $(W/nd)^*$  на графике наблюдается прямо пропорциональная зависимость, свидетельствует о том, что эти условия удовлетворяют росту только основной популяции МК. Выше точки перегиба возможно образование популяции новых зародышей, критический размер  $d^*$  для которых зависит от пересыщения, т.е. от размеров МК в исходной популяции. По мере роста МК, величина  $S$  снижается, и мелкие МК не образуются. Таким образом, для всех исследуемых размеров МК различного габитуса критическое пересыщение находилось в диапазоне значений 1,1-1,2 и не сильно зависело от размеров МК.

По соотношению Гиббса-Томсона, принимая величину поверхностной энергии для AgBr  $\gamma$  равной  $140 \text{ эрг/см}^2$ , рассчитан размер критического зародыша в зависимости от условий кристаллизации, в том числе, от размеров исходной популяции МК:

$$d^* = \frac{4\gamma V_m}{RT \ln S^*} = 30 \text{ нм}$$

В точке перегиба значение  $W/nd$  позволяет оценить критическую скорость роста  $G^* \approx 1 \text{ \AA/с}$ .

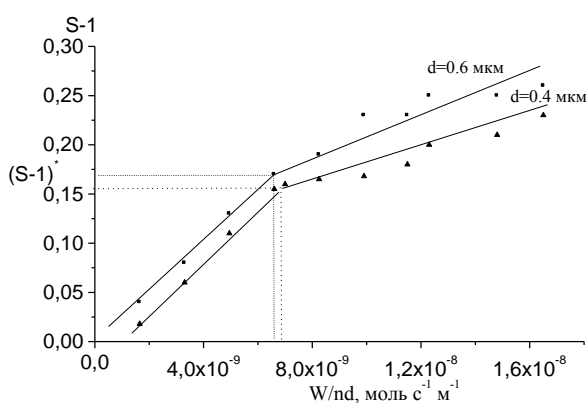


рис. 1

рис. 1. Зависимость величины пересыщения  $S$  от  $(W/nd)$ .

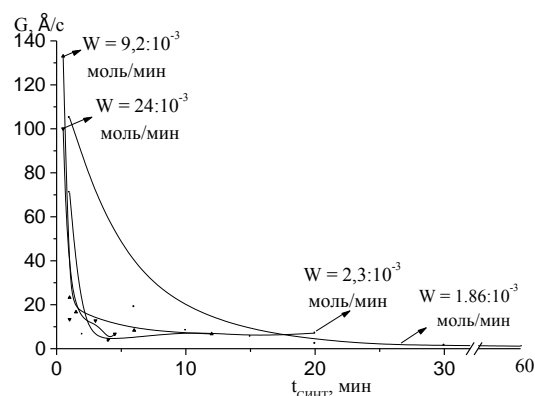


рис. 2

рис. 2. Изменение скорости роста МК AgBr (111) во время синтеза при различных скоростях подачи растворов.

На рис. 2. Приведены зависимости скорости роста МК AgBr (111) при различных скоростях подачи растворов в реактор. Как следует из полученных данных, значения  $G^* = 1 \text{ \AA/с}$  достигается только при малых скоростях введения реагентов даже на заключительной стадии синтеза. При всех других временах, значения  $G^*$  находятся в пределах  $10-100 \text{ \AA/с}$ .

Многочисленные эксперименты по эпитаксиальному росту монокристаллических пленок полупроводников, металлов и диэлектриков свидетельствуют, что при скоростях осаждения  $\sim 1 \text{ \AA}/\text{с}$  на подложке при  $T > 400 \text{ }^\circ\text{C}$  формируются монокристаллические пленки. При всех других скоростях, даже при  $T \sim 400 \text{ }^\circ\text{C}$  растут разориентированные блочные структуры – текстуры или поликристаллические и аморфные слои. В нашем случае это означает, что на начальных стадиях эффективная скорость роста выше критической более чем на порядок величины. Поэтому есть основания предполагать, что ядровая часть МК представляет собой разупорядоченную структуру. На заключительной стадии синтеза условия осаждения удовлетворяют требованиям для формирования монокристаллической, более совершенной структуры. С этим предположением находятся в соответствии данные по увеличению проводимости в МК AgVt (111) с увеличением скорости синтеза, а также по растворимости этих МК, обнаруживающие блочную структуру. Полученный результат позволяет объяснить рост ионной проводимости с увеличением скорости роста МК и, как следствие, меньшую эффективность собственного созревания этих эмульсий.

Список публикаций:

[1] И.А. Сергеева, П.С. Бондаренко, И.Л. Колесникова, А.Л.Юдин, Л.В. Колесников. // *Материаловедение*. 2 (71). 2003. С. 23-27

## Плоские дефекты ориентации (0001) в сплавах HfPt<sub>3</sub> и ZrPt<sub>3</sub> со сверхструктурой D0<sub>24</sub>

*Гейнман Андрей Аркадьевич*

*Алтайский Государственный Технический Университет*

*Дубов Евгений Александрович, к.ф.-м.н.*

*Баранов Михаил Александрович, д.ф.-м.н.*

*[drulya@inbox.ru](mailto:drulya@inbox.ru)*

Одной из причин более высоких прочностных характеристик упорядоченных сплавов по сравнению с неупорядоченными является присутствие в них специфических плоских дефектов антифазных границ (АФГ), дефектов упаковки (ДУ) и их комплексов. Искажение кристаллической решетки вблизи плоских дефектов оказывается существенными препятствиями для скольжения дислокаций как в плоскости дефекта, так и в пересекающих ее плоскостях и, следовательно, фактором повышающим прочностные свойства кристалла. С помощью современных экспериментальных средств пока не удается воссоздать на атомном уровне картину искажений решетки вблизи дефектов. Однако это может быть достигнуто методом компьютерного моделирования.

В работе выполнено моделирование дефектов в базисной плоскости сплавов HfPt<sub>3</sub> и ZrPt<sub>3</sub>. Описание устойчивого состояния сверхструктуры D0<sub>24</sub> характерной для указанных сплавов, достигалось путем применения парных нецентральных анизотропных потенциалов. Вид потенциалов задавался функцией Морза модулированной функцией зависящей от угла между вектором межатомной связи и главной осью кристалла. Параметры потенциалов связывающих атомы одинакового сорта в сплаве определялись из условий устойчивости кристаллической решетки соответствующего металла. Экспериментальные данные о решетке сплава использовались для определения параметров потенциалов Hf – Pt, Zr – Pt.

Стартовая конфигурация дефекта создавалась путем проведения в кристалле плоскости параллельной базисной. Затем выполнялся либо последующий сдвиг одного из полукристаллов на заданный вектор в базисной плоскости с образованием ДУ, либо замена сортов атомов в одной из половин кристалла с сохранением исходной сверхструктуры. Из положений соответствующих стартовой конфигурации атомы смещались в направлениях действующих на них сил вплоть до достижения равновесных состояний. Рассчитанные значения энергий образования плоских дефектов в сплавах со сверхструктурой D0<sub>24</sub> приведены в таблице:

Сплав	Тип дефекта	Вектор сдвига	Стартовая энергия образования дефекта, мДж/м <sup>2</sup>	Равновесная энергия образования дефекта, мДж/м <sup>2</sup>
HfPt <sub>3</sub>	АФГ	$a_0/2 < 10\bar{1}0 >$	145.56	121.65
	СДУ(1)	$a_0/6 < \bar{1}\bar{2}30 >$	145.56	115.51
	СДУ(2)	$a_0/6 < 12\bar{3}0 >$	145.56	115.51
	КДУ(1)	$a_0/3 < 1\bar{1}00 >$	4077.10	2434.91
	КДУ(2)	$a_0/3 < 21\bar{3}0 >$	4077.10	2432.11
ZrPt <sub>3</sub>	АФГ	$a_0/2 < 10\bar{1}0 >$	357.69	341.75
	СДУ(1)	$a_0/6 < \bar{1}\bar{2}30 >$	357.69	337.76



	СДУ(2)	$a_0/6 \langle 12\bar{3}0 \rangle$	357.69	337.76
	КДУ(1)	$a_0/3 \langle 1\bar{1}00 \rangle$	4775.80	1325.25
	КДУ(2)	$a_0/3 \langle 21\bar{3}0 \rangle$	4775.80	1293.93

Из данных таблицы следует, что образование КДУ(1) и КДУ(2) оказывается невозможным. АФГ, СДУ(1), СДУ(2) оказываются кристаллогеометрически эквивалентными в том смысле, что при их образовании происходит разрыв и восстановление одинакового набора межатомных связей. Однако ориентация этих связей вблизи указанных дефектов различна. Об этом свидетельствуют различия в равновесных энергиях образования АФГ и СДУ, а так же различные атомные конфигурации соответствующие этим дефектам.

Отмеченные особенности вероятнее всего являются кристаллогеометрическими, поскольку они характерны по крайней мере для двух сплавов сверхструктуры  $D0_{24}$ .

## Исследование фазового перехода в оксифториде $(NH_4)_3WO_3F_3$ методом комбинационного рассеяния света

*Герасимова Юлия Валентиновна*

*Втюрин Александр Николаевич, Крылов Александр Сергеевич*

*Институт Физики им. Киренского СО РАН*

*Втюрин Александр Николаевич*

*[jul@iph.krasn.ru](mailto:jul@iph.krasn.ru)*

Структура большого числа кристаллов фторидов с общей формулой  $A_3M^{3+}F_6$  в высокотемпературной фазе имеет кубическую симметрию с пространственной группой  $Fm\bar{3}m$  ( $Z=4$ ) и относится к семейству криолита-эльпасолита (перовскитоподобных структур). Ранее было показано, что при частичном замещении ионов фтора кислородом исходная кубическая симметрия высокотемпературной фазы сохраняется; при этом атомы фтора и кислорода оказываются статистически распределены в кристаллической решетке, тогда как локальная симметрия октаэдров  $WO_xF_{6-x}$  оказывается ниже кубической. При понижении температуры оксифториды и фториды испытывают последовательности фазовых переходов, которые могут быть связаны как с поворотами октаэдрических ионов, так и с их ориентационным упорядочением. Природа искаженных фаз также может быть различной: фториды являются сегнетоэластиками, тогда как оксифториды испытывают и сегнетоэлектрические, и сегнетоэластические превращения. Замещение катиона  $A^+$  на ион аммония во фторидах приводит к существенному понижению температуры потери устойчивости кубической фазы и к возможности дополнительного структурного беспорядка, связанного с ориентационными степенями свободы этого катиона. В настоящее время исследования фазовых переходов в аммонийных оксифторидах только начаты, каким образом подобные эффекты будут проявляться в этих соединениях, пока неясно.

В предлагаемой работе были проведены исследования кристалла  $(NH_4)_3WO_3F_3$  с целью выяснения механизма обнаруженного в нем фазового перехода методом комбинационного рассеяния света (КР). Спектры КР в диапазоне  $70-3600 \text{ cm}^{-1}$  в геометрии рассеяния назад были получены на Фурье-Раман спектрометре RFS100/S (Bruker). В качестве источника возбуждения использовалось излучение Nd:YAG лазера с длиной волны 1.06 мкм и мощностью 350 мВт. Впервые были получены и проанализированы спектры комбинационного рассеяния света крупнокристаллического порошка  $(NH_4)_3WO_3F_3$  (рис. 1) в температурном интервале 93–327 К, идентифицированы линии внутренних валентных и деформационных колебаний ионов аммония и колебания связей W–O анионов  $WO_3F_3^{3-}$  (для интерпретации последних использовались результаты квантово-химического расчета).

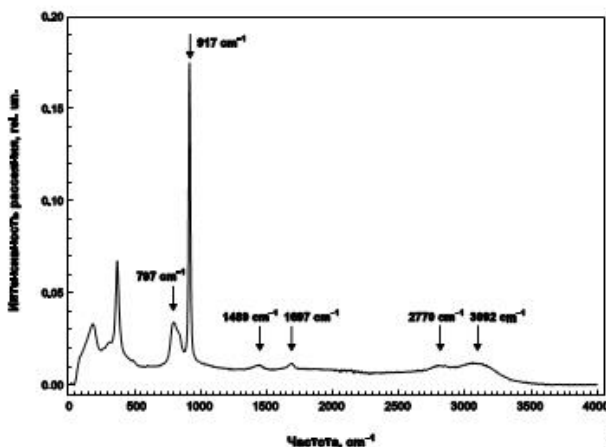


рис. 1. Обзорный спектр КР кристалла  $(NH_4)_3WO_3F_3$  при комнатной температуре.

Полученные спектры сравнительно мало меняются при охлаждении образца вплоть до температуры фазового перехода 200 К (за исключением незначительного закономерного уменьшения ширины линий), ниже которой спектр существенно модифицируется. В областях валентных и деформационных внутренних колебаний ионов аммония наблюдается значительный рост интенсивности рассеяния, на месте одиночных линий формируются сложные структурированные полосы. При дальнейшем охлаждении вплоть до 90 К рост интенсивности продолжается, линии остаются широкими (характерные полуширины составляют более  $100 \text{ cm}^{-1}$ ). Область валентных колебаний W–O связей также значительно модифицируется. Наиболее интенсивная спектральная линия  $917 \text{ cm}^{-1}$  резко сужается и расщепляется на две. На температурных зависимостях частот и полуширин образующегося дублета ясно видно аномальное поведение затухания образовавшегося дублета при фазовом переходе. В то же время величина затухания вдали от перехода остается практически постоянной – последнее свидетельствует, что в данном случае затухание этих колебаний определяется, главным образом, не их ангармонизмом. Схожие изменения происходят и с полосой  $775\text{--}850 \text{ cm}^{-1}$ . (см. рисунок). Уже на 1–2 К ниже перехода образующие ее линии заметно сужаются и становятся хорошо видно, что эта полоса состоит из трех линий. При дальнейшем охлаждении каждая из них расщепляется на дублет, компоненты которых продолжают раздвигаться по частоте и незначительно сужаться. Аналогичные, хотя и не столь ярко выраженные изменения происходят и в низкочастотной части спектра. Подобные изменения спектра, очевидно, связаны, с процессами ориентационного упорядочения молекулярных ионов при фазовом переходе – как уже упоминалось выше, в кубической фазе и ионы аммония, и ионы  $\text{WO}_3\text{F}_3^{3-}$  ориентационно разупорядочены. Резкое уменьшение ширины внутренних колебаний W–O свидетельствует о том, что ниже перехода происходит ориентационное упорядочение анионов. В то же время катионы аммония остаются ориентационно неупорядочены – и с этим связаны большие ширины линий их внутренних колебаний. Усилившееся взаимодействие этих катионов с упорядоченной анионной подрешеткой приводит к их заметному искажению (вполне вероятно возникновение водородных связей между протонами аммония, с одной стороны, и кислородом и фтором упорядоченной анионной подрешетки, с другой), с чем и связано усложнение высокочастотной части спектра и увеличение его интенсивности.

По итогам работы сделаны следующие выводы:

1. Сравнение спектров валентных колебаний анионов  $\text{WO}_3\text{F}_3^{3-}$  с результатами квантово-химических расчетов подтверждает, что данные катионы в структуре исследуемого кристалла присутствуют, главным образом, в *cis* конфигурации.

2. Все молекулярные ионы в кубической фазе кристалла ориентационно разупорядочены, что подтверждается большими ширинами соответствующих линий и слабой зависимостью их ширины от температуры вдали от фазового перехода.

3. При охлаждении кристалла ниже точки фазового перехода (200 К) происходит ориентационное упорядочение анионной подрешетки – что проявляется в резком сужении линий, соответствующих колебаниям связей W–O. Вероятно, одновременно удваивается объем элементарной ячейки кристалла, что приводит к расщеплению этих линий на дублеты. Усиление взаимодействия ионов аммония с упорядочивающейся аммонийной подрешеткой приводит к их искажению, что проявляется в расщеплении линий, соответствующих их внутренним колебаниям и росту их интенсивности, однако они остаются ориентационно неупорядочены.

4. Анализ результатов позволяет утверждать, что исследованный фазовый переход связан, главным образом, с упорядочением октаэдрических групп.

## **Роль электронной структуры в процессах неравновесной миграции водорода в металлах**

**Гимранова Олеся Владимировна**  
*Коротеев Юрий Михайлович, Черноз Иван Петрович*  
*Томский Политехнический Университет*  
*Коротеев Юрий Михайлович*  
[gimranova@mail.ru](mailto:gimranova@mail.ru)

Современные экспериментальные и теоретические методы исследования позволяют изучать атомные и электронные процессы в твердых телах на микроскопическом уровне, и это дает возможность существенно продвинуться в понимании механизмов взаимодействия водорода с металлами. Однако остается некоторый пробел в изучении свойств возбужденных состояний системы металл-водород, возникающих при воздействии различного рода ионизирующих излучений. Накопленные к настоящему моменту экспериментальные факты [1,2] еще не получили всестороннего теоретического рассмотрения с использованием новых подходов, включая квантовомеханические расчеты. В частности остается неясным механизм неравновесного выхода атомарного водорода из металлов при облучении. Было установлено, что воздействие ионизирующего излучения подпороговых энергий, приводящего, в основном, лишь к возбуждению электронной подсистемы кристалла, на систему металл-водород приводит к выделению атомарного, т.е. неравновесного, водорода со всей поверхности

образца, а не только из области воздействия пучка [1,2]. Эффект обусловлен, по-видимому, тем обстоятельством, что несмотря на малое время жизни отдельного одноэлектронного возбуждения ( $10^{-16}$  с) [3], ионизирующая частица, двигаясь сквозь кристалл, возбуждает коллектив электронов в достаточно протяженной области (иногда сопоставимой с размерами кристалла) и это может привести к возникновению коллективного возбуждения с временем жизни порядка  $10^{-12}$  с [3]. Можно ожидать, что в результате повышения энергии валентных электронов в этой локальной области изменятся силы межатомного взаимодействия на время существования возбужденного состояния, а это изменит кинетику микропроцессов, происходящих в этой области и связанных с радиационным воздействием на кристалл.

Настоящая работа посвящена изучению электронного строения систем металл-водород и выявлению его особенностей, способных существенно влиять на кинетику релаксации электронного возбуждения и быть причиной неравновесной миграции водорода под действием облучения. Для проведения численных расчетов был выбран титан, как один из металлов, обладающих особыми свойствами по отношению к адсорбции и растворению водорода.

В работе самосогласованный расчет электронной структуры проводился методом ЛППВ [4] в скалярно-релятивистской версии Основной конструктивной идеей метода ЛППВ является деление кристалла на области двух типов. Для каждой из них используется свой вид базисных функций. Это обусловлено специальным выбором кристаллического потенциала в МТ-форме. А именно объём элементарной ячейки делится на две области: 1) области МТ-сфер, содержащие потенциалы ионных остовов (области наиболее сильного изменения потенциала), где потенциал считается сферически симметричным; 2) межатомную область (область вне МТ-сфер), где потенциал постоянен. В работе были рассчитаны также локальное (по МТ-сферам) и орбитальное (по  $s$ -,  $p$ - и  $d$ -состояниям) распределения заряда в элементарной ячейке. Обнаружено, что в МТ-сфере водорода зарядовая плотность обусловлена практически лишь  $s$ -состоянием, тогда как в МТ-сфере титана присутствуют вклады от орбиталей всех трёх типов. По-видимому, можно говорить о переносе электронного заряда от атомов водорода к титану при образовании металл гидридной  $\gamma$ -фазы  $TiH_x$ . Однако, не смотря на это, электронная плотность внутри МТ-сфер атомов водорода оказывается более, чем в полтора раза выше аналогичной величины в МТ-сферах титана. По мере увеличения концентрации водорода в кристалле наблюдается значительное повышение электронной плотности в его МТ-сфере и для кристалла  $TiH_2$  она уже в 2.7 раза превосходит электронную плотность в МТ-сферах титана. Это говорит о появлении дополнительной неоднородности распределения электронной плотности в системах металл-водород, свойственной ковалентным кристаллам.

Все отмеченные выше факты свидетельствуют о значительном изменении типа связывания и топологии поверхности Ферми в титане в результате растворения в нем водорода. Предлагается гипотеза, согласно которой возбуждение водородной подсистемы соединения  $Ti-H$  связано с возникновением под воздействием облучения неравновесного пространственного и энергетического распределения валентной электронной плотности в кристалле.

Список публикаций:

- [1]. Мамонтов А.П., Чернов И.П. Эффект малых доз ионизирующего излучения. М.: Энергоатомиздат, 2001. 286с.
- [2]. Баумбах Х., Крёниг М., Тюрин Ю.И., Чернов И.П., Черданцев Ю.П. Неравновесные системы металл-водород. Титан, нержавеющая сталь. Томск: Изд-во Том. Ун-та, 2002. 352с.
- [3]. Действие излучения большой мощности на металлы / С.И. Анисимов, Я.И. Имас, Г.С. Романов и др. - М.: Наука, 1970.- 245с.
- [4]. Andersen O.K. // Phys. Rev. 1975. V.B12. N.8. P. 864-871.

## Температурная зависимость зонной структуры сульфата натрия

Головко Ольга Владимировна

Кемеровский Государственный Университет

Журавлев Юрий Николаевич д.ф.-м.н.

[sister\\_o@rambler.ru](mailto:sister_o@rambler.ru)

Сульфат натрия представляет собой твердый электролит. Имеет ромбическую структуру с группой симметрии  $D_{2h}^{17}$ . В элементарной ячейке находится две молекулы. Расчет электронной структуры проводился в рамках теории локальной электронной плотности методом псевдопотенциала в базе численных  $sp^3d^5$  атомных псевдоорбиталей [1]. Зонный спектр  $Na_2SO_4$  и плотность состояния были рассчитаны при температурах 298 К, 463 К и 505 К. (см. рис.1).

В сульфате натрия атом серы образует одну подрешетку, атомы натрия - две неэквивалентные подрешетки с расстояниями  $Na_1-S=3.575$  Å,  $Na_2-S=3.046$  Å и две неэквивалентные подрешетки образованы атомами кислорода  $O_1$  и  $O_2$  ( $O_1-S= 1.482$  Å,  $O_2-S= 1.466$  Å), с базисом элементарной ячейки:  $a=5.627$  Å,  $b=8.966$  Å,  $c=6.974$  Å при температуре 298 К.

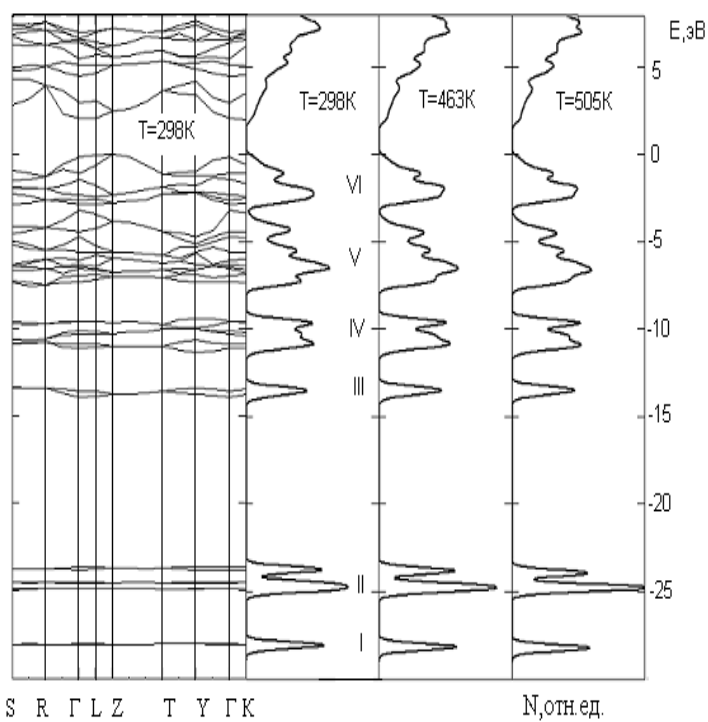


рис.1

При температуре  $T=298$  К ширина валентной зоны составляет 28,0 эВ. Самая нижняя связка из двух зон имеет ширину 0,07 эВ, ей в плотности состояния соответствует пик интенсивностью 0.23 с энергией  $-28.1$  эВ. Связка II, состоящая из пяти зон, имеет ширину 1,3 эВ. Для данной связки характерно расщепление, обусловленное наличием двух подрешеток. Плотность состояния соответствующая большему пику с интенсивностью 0.31 ( $-24.7$  эВ), меньшему пику – 0.23 ( $-23.7$  эВ). Связка III состоит из двух зон шириной 0.6 эВ, ей в плотности состояния соответствует пик интенсивностью 0.18 (0.2 эВ). Четвертая связка из 6 зон – 4.3 эВ, соответствующие ей пики интенсивностью 0.20 ( $-10.8$  эВ) и 0.19 ( $-9.6$  эВ). Верхняя валентная область разделена на две подзоны, которым отвечают полосы V и VI. Самая верхняя валентная зона состоит из 6 зон шириной 2,8 эВ, отвечающий ей пик в плотности состояния имеет значение  $-0.20$  ( $-2.3$  эВ). Зона, которой отвечает полоса V имеет 10 зон шириной 4.3 эВ, а соответствующий ей пик в  $N(E)$  имеет интенсивность 0.25 ( $-6.5$  эВ).

Вершина валентной зоны реализуется в точке Z зоны Бриллюэна. Конкурирующий максимум с энергией  $-0.2$  эВ имеется в точке Г, а минимум самой верхней валентной зоны приходится на точку R и имеет энергию  $-1.3$  эВ. Дно нижней незаполненной зоны с энергией 1.9 эВ приходится на линию К, ближайший минимум приходится на линию L (2.03эВ). При этом нижняя связка из двух незаполненных зон отделена в большинстве высокосимметричных точек и линий запрещенным энергетическим интервалом.

Зонная структура сульфата натрия с увеличением температуры не изменяется. В кристаллической структуре при температуре больше чем 298 К происходят следующие изменения: увеличивается расстояние в подрешетках, образованных атомами металла ( $Na_1-S=3.607$  Å,  $Na_2-S=3.073$  Å) и уменьшается в подрешетках, образованных атомами кислорода ( $S-O_1=1.476$  Å,  $S-O_2=1.458$  Å) с базисом элементарной ячейки:  $a=5.635$  Å,  $b=9.034$  Å,  $c=7.020$  Å при 463 К. Для температуры 505 К расстояния равны:  $Na_1-S=3.611$  Å,  $Na_2-S=3.084$  Å,  $S-O_1=1.477$  Å,  $S-O_2=1.450$  Å с базисом:  $a=5.633$  Å,  $b=9.054$  Å,  $c=7.034$  Å. С повышением температуры увеличивается ширина валентной зоны на величину порядка 0.1 эВ. В связках I, IV, V максимальные пики в плотности состояния смещаются в область с меньшей энергией, интенсивность не изменяется, ширина связок уменьшается на 0.1 эВ. Для связок III, VI наблюдается смещение пиков в область большей энергии на 0.2 эВ, ширина связок и интенсивность в плотности состояния не изменяется. Для связки II наблюдаются существенные изменения. Ширина связки II уменьшается и составляет 1.2 эВ ( $T=463$ К) и 1.1 эВ ( $T=505$ К). Происходит смещение пиков в область с меньшей энергией на 0.1 эВ. Интенсивность максимальных пиков увеличивается с ростом температуры и составляет 0.36 (463 К) и 0.42 (505К). Интенсивность минимальных пиков не изменяется.

Значительные изменения происходят в зоне проводимости. Дно данной зоны приходится на линию К с энергией 1.8 эВ (463 К) и 1.7эВ (505 К).

Полученные значения могут быть использованы при интерпретации физических и физико-химических свойств этого соединения.

#### Список публикаций:

[1]. Журавлев Ю.Н., Басалаев Ю.М., Поплавной А.С. Известия вузов. Физика. — №3. – С. 96, 2000.

## Исследование связи микро- и мезомасштабных уровней при численном моделировании механических явлений в наноструктурах.

Головнева Елена Игоревна

Головнев Игорь Федорович, Фомин Василий Михайлович

Институт Теоретической и Прикладной Механики СО РАН

[Elena@itam.nsc.ru](mailto:Elena@itam.nsc.ru)

Основная цель – на примере бездефектного нанокристалла меди – т.н. элементарный объем, провести сравнение результатов, получаемых в рамках молекулярной динамики и проверить выполнение основных соотношений механики деформируемого твердого тела. Для этого кристаллы нагружались внешними силами контролируемой величины, и находилось конечное динамически равновесное состояние. В этом состоянии определялись геометрические характеристики объекта и напряжение – как внешнее, так и в сечениях. Далее использовались известные соотношения из механики деформируемого твердого тела, и проверялось их выполнение при подстановке количественных значений, найденных из молекулярно-динамических расчетов. Для получения конечного статически равновесного состояния в расчетах использовалась искусственная вязкость – на каждый атом действовала сила трения  $F = -\gamma p$ , где  $p$  – импульс атома.

Для исследования взаимосвязи микро- и мезомасштабного уровней рассматривалось три типа нагружения кристалла: одноосное растяжение, всестороннее сжатие и сдвиг. Для расчета ряда механических мезо- и макро-характеристик необходимо знание геометрических параметров мезоячейки и всего кристалла. При этом в основе определения границы кристалла лежит определение собственного объема атома или плотности вещества  $\rho$ , известной из эксперимента. Количественный анализ показал, что для этого необходимо границу кристалла определять на расстоянии  $a/4$  от граничных атомов, где  $a$  – размер кристаллической ячейки.

Физическая система и метод расчета подробно представлены в работах [1, 2].

Расчет локальной компоненты тензора напряжений  $\sigma_{xx}$  для одноосного растяжения кристалла проводился двумя способами. Согласно определению это сила в направлении оси  $X$ , действующая на единицу площади, перпендикулярной оси  $X$ . Пусть  $f_x$  – полная сила, действующая на атомы, находящиеся по одну сторону сечения площади  $S$  со стороны атомов, расположенных по другую сторону этого сечения. Тогда

$$\sigma_{xx} = f_x / S. \quad (1)$$

Второй способ – использование формулы, полученной в рамках кинетической теории [3]. В случае статического равновесия эта формула приобретает вид:

$$\sigma_{\alpha\beta} = 1/V_c \cdot [0.5 \cdot \sum_{i \neq j} F_{ij}^{\alpha} r_{ij}^{\beta}] \quad (2)$$

Здесь:  $V_c$  – объем исследуемой системы,  $m$  – масса атома,  $r_{ij}^{\beta}$  –  $\beta$ -ая компонента радиус-вектора между  $i$  – ой и  $j$  – ой частицами. Суммирование ведется по всем частицам, находящимся в исследуемом объеме.

Анализ результатов, полученных в рамках молекулярно-динамического моделирования, позволяет сделать вывод, что применение основных положений механики деформируемого тела к нанообъектам правомерно, если необходимые механические характеристики найдены в рамках молекулярной динамики с использованием квантово-механических потенциалов взаимодействия атомов. При этом возможны две концепции применения этой теории. Первая – это рассмотрение наноструктуры как “элементарного” неделимого объема с соответствующими механическими параметрами, описывающими адекватно отклик этого объекта на внешнее механическое возмущение. Второй – применение основных положений механики деформируемого тела к расчету процессов внутри нанообъектов. При этом необходимо использовать “локальные” механические параметры, найденные также в молекулярно динамических расчетах. Показано, что результаты, полученные в рамках обоих подходов, совпадают, когда число кристаллических ячеек в наноструктуре становится много больше единицы.

Список публикаций:

[1] Головнев И.Ф., Конева Е.И., Фомин В.М., *Физическая мезомеханика*, 4, 5, 5-11 (2001).

[2] Головнев И.Ф., Головнева Е.И., Конев А.А. и Фомин В.М., 1, 2, 19-30 (1998).

[3] Зубарев Д.Н. *Неравновесная статистическая термодинамика*. – М.: Наука. 415 (1971).

## Метод многократного рассеяния в теории динамической дифракции электронов

*Гончар Анастасия Александровна*

*Ростовский Государственный Университет*

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

*[stasia@aanet.ru](mailto:stasia@aanet.ru)*

Предложен новый подход к описанию динамической дифракции электронной волны в кристалле. Подход основан на записи уравнений метода многократного рассеяния электронных волн атомами в кристалле и упрощения этих уравнений в условиях, близких к условию брэгговского рассеяния за счет учета только рассеяния первичной и дифрагированной электронных волн «вперед» и взаимодействия этих волн друг с другом, поскольку только такие процессы в случае слабого взаимодействия электронов с отдельными атомами ведут к существенной перестройке падающей и дифрагированной волн.

Проведено упрощение полученных уравнений, позволившее для однородной кристаллической пластины и полубесконечного кристалла получить систему линейных одномерных интегральных уравнений. Найдены решения этой системы и выполнено исследование зависимости этих решений от амплитуд рассеяния электронных волн атомами.

## Структура и диэлектрические свойства новых фаз Ауривиллиуса:

**$\text{Bi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$  и  $\text{Bi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$**

*Дранников Дмитрий Сергеевич*

*Власенко Валерий Григорьевич, Шуваев Анатолий Тарасович, Зарубин Иван Андреевич*

*Ростовский Государственный Университет*

*Власенко Валерий Григорьевич, к.ф.-м.н.*

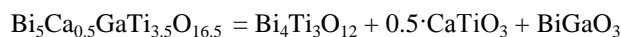
*[unysko@ctsnet.ru](mailto:unysko@ctsnet.ru)*

Фазы Ауривиллиуса (ФА) представляют собой достаточно большое семейство висмутсодержащих слоистых перовскитоподобных соединений, обладающих сегнетоэлектрическими свойствами.

Химический состав ФА описывается общей формулой  $A_{m-1}\text{Bi}_2\text{B}_m\text{O}_{3m+3}$ , где позиции А занимают ионы с большими радиусами ( $\text{Bi}^{3+}$ ,  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Sr}^{2+}$ ,  $\text{Ba}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$ ,  $\text{Th}^{4+}$  и  $\text{Ln}^{3+}$  (лантаниды)), позиции В внутри кислородных октаэдров занимают ионы с малыми радиусами ( $\text{Ti}^{4+}$ ,  $\text{Nb}^{5+}$ ,  $\text{Ta}^{5+}$ ,  $\text{W}^{6+}$ ,  $\text{Mo}^{6+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{4+}$ ,  $\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{Ga}^{3+}$ ). Значение m определяет количество перовскитоподобных слоев  $[\text{A}_{m-1}\text{B}_m\text{O}_{3m+1}]^{2-}$ , находящихся между слоями  $[\text{Bi}_2\text{O}_2]^{2+}$ , и может принимать целые или полуцелые значения в интервале 1-5. Если m-полуцелое число, то решетка содержит перовскитоподобные слои разной толщины. Например, при m=4.5 в решетке имеется равное число слоев с m=4 и m=5. Эти слои в принципе могут быть разупорядочены или упорядочены. Позиции А и В могут быть заняты одинаковыми или несколькими различными атомами.

К настоящему времени синтезировано более сотни ФА различного состава и возможны получения новых ФА. Однако представителей ФА с полуцелым m синтезировано очень мало. Трудность получения таких соединений заключается в том, что при их синтезе, как правило, происходит образование двух ФА, имеющих целое значение m. В качестве примеров успешного синтеза ФА с полуцелым m можно привести  $\text{Bi}_5\text{Nb}_3\text{O}_{15}$  (m=1.5),  $\text{ABi}_6\text{Ti}_3\text{Nb}_2\text{O}_{21}$  (A=Sr, Ba),  $\text{Bi}_7\text{Ti}_4\text{VO}_{21}$  (B=Nb, Ta) (m=2.5),  $\text{ABi}_8\text{Ti}_7\text{O}_{27}$  (A=Sr, Pb, Ba),  $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{8.5}\text{Ti}_7\text{O}_{27}$  (m=3.5). ФА с полуцелым m более 3.5 синтезировано до последнего времени не было. В настоящей работе проведен успешный синтез двух новых ФА с m=4.5  $\text{Bi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$  и  $\text{Bi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$ . Исследование кристаллической структуры этих соединений проведено методом порошковой рентгеновской дифракции. Кроме того, исследованы их диэлектрические свойства в широком интервале температур.

Выбор элементных составов новых ФА производился комбинаторным методом [1], который позволяет заметно увеличить вероятность успешного синтеза. Согласно этому методу состав всех известных и гипотетических ФА может быть представлен в виде линейной комбинации составов некоторых простейших базовых ФА и оксидов со структурой перовскита (ОСП). Процедура поиска новых составов ФА сводится к подбору коэффициентов в линейных комбинациях базовых ФА и ОСП таким образом, чтобы реализовывался формульный состав ФА. Элементные составы исследованных соединений можно представить в виде следующих линейных комбинаций:



Поликристаллические образцы  $\text{Bi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$  и  $\text{Bi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$  синтезированы путем твердофазной реакции соответствующих оксидов  $\text{Bi}_2\text{O}_3$ ,  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{PbO}$ ,  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  и карбоната  $\text{CaCO}_3$ . Все исходные соединения имели марку ОСЧ. Взвешенные в соответствии со стехиометрическим составом синтезируемого соединения порошки оксидов после продолжительного измельчения и перемешивания прессовались в виде таблеток.

Обжиг образцов осуществлялся в лабораторной муфельной печи на воздухе. Предварительный нагрев образца производился до температур  $T = 770^\circ\text{C}$ , после чего производилось промежуточное измельчение. Окончательный обжиг осуществлялся при температуре  $T = 1020^\circ\text{C}$ .

Рентгеновские дифракционные спектры получены на дифрактометре ДРОН-3М с приставкой для порошковой дифракции ГП-13 и рентгеновской трубкой БСВ21-Cu.  $\text{CuK}\alpha_{1,2}$ -излучение выделялось из общего спектра с помощью Ni-фильтра. Регистрация спектра производилась в интервале  $2\theta$ -углов от  $5^\circ$  до  $120^\circ$  с шагом  $0.02^\circ$  и временем регистрации интенсивности в точке 30-40 сек.

Для проведения электрических измерений образцы были спрессованы в виде таблеток диаметром 10 мм и толщиной 1-2 мм, на боковые поверхности которых были нанесены серебряные электроды. Электрические измерения проводились с помощью моста переменного тока P5016 в частотном интервале 1-50 kHz и в области температур от комнатной до  $900^\circ\text{C}$ .

На основе экспериментально полученных рентгеновских дифрактограмм определена структура  $\text{Vi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$  и  $\text{Vi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$ . Анализ структуры полученных соединений в соответствии с выбранной моделью производился с использованием программного пакета PowderCell-2.4. Фон, вычитаемый из общего спектра, был представлен в виде полинома седьмой степени. Для описания профиля дифракционных линий использовалась псевдо-Voigt функция, являющаяся линейной комбинацией функций Гаусса и Лоренца.

Кристаллическая система элементарных ячеек  $\text{Vi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$  и  $\text{Vi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$  орторомбическая, с пространственной группой  $\text{Cmmm}$  (65). Параметры элементарных ячеек исследованных соединений приведены в таблице:

№	соединение	m	Параметры ячейки, Å		
			a	b	c
1	$\text{Vi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$	4.5	5.4434(1)	5.4506(1)	45.527(2)
2	$\text{Vi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$	4.5	5.3868(7)	5.4185(8)	45.267(5)

Величина «R»-фактора, являющегося численным критерием достоверности определения интенсивности линий и параметров элементарной ячейки в рамках приписываемой пространственной группы, имеет значение  $R_p = 2.77\%$  для соединения  $\text{Vi}_2\text{CaNaNb}_3\text{O}_{12}$ , и  $R_p = 3.65\%$  для соединения  $\text{Vi}_2\text{CaNa}_2\text{Nb}_4\text{O}_{15}$ , что указывает на высокое качество подгонки теоретических спектров к экспериментальным. Вычислены значения  $F_{30}$  для оценки качества определения параметров ячейки по Смиту и Снайдеру. Фактор  $F_{30}$  принимает значения  $F_{30} = 14.6(0.0075, 273)$  для ФА  $\text{Vi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$  и  $F_{30} = 13.0(0.0095, 275)$  для ФА  $\text{Vi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$ . Указанные значения  $F_{30}$  свидетельствуют о хорошем индицировании спектров. Увеличение параметров элементарной ячейки для ФА  $\text{Vi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$  по сравнению с  $\text{Vi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$  обусловлено сильной поляризованностью иона  $\text{Pb}^{2+}$  из-за присутствия  $6s^2$  неподеленной пары.

Температурные зависимости диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$  для исследованных соединений, получены на частотах 1-50 кГц. Для обоих соединений на графике зависимости  $\epsilon'(T)$  существуют два максимума: широкий низкотемпературный и более узкий высокотемпературный (см. рис.1).

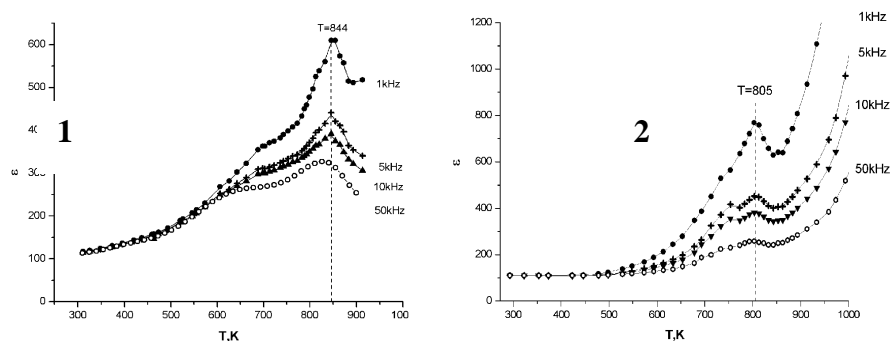


рис 1. Температурные зависимости диэлектрической проницаемости  $\epsilon'$  для  $\text{Vi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$  (1) и  $\text{Vi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$  (2).

Такой вид  $\epsilon'(T)$  характерен для ФА с полувещью m, например, для  $\text{CaVi}_8\text{Ti}_7\text{O}_{27}$  ( $m=3.5$ ) и  $\text{Vi}_7\text{Ti}_4\text{NbO}_{21}$  ( $m=2.5$ ). Для соединения  $\text{Vi}_5\text{Ca}_{0.5}\text{GaTi}_{3.5}\text{O}_{16.5}$  широкий низкотемпературный максимум имеет значение  $T_1 = 730-750^\circ\text{K}$ , а высокотемпературный-  $T_2 = 805^\circ\text{K}$ , а для  $\text{Vi}_4\text{Pb}_{1.5}\text{Ti}_{4.5}\text{O}_{16.5}$   $T_1 = 670-690^\circ\text{K}$  и  $T_2 = 844^\circ\text{K}$ , соответственно.

Значения  $T_2$  соответствуют значению температуры Кюри  $T_C$  в этих соединениях. Температуры Кюри, найденные для ФА с целыми и полужелтыми  $m$  соответствующего состава имеют близкие значения.

Список публикаций:

[1] Шуваев А.Т., Власенко В.Г., Дранников Д.С. // *Электр. журн. «Исследовано в России»*, 87. стр.972-980.(2003).

## **Компьютерное моделирование одноосной деформации массивного аморфного сплава $Cu_{34}Zr_{36}$**

**Дунаев Дмитрий Георгиевич**

*Евсеев Александр Викторович, Косилов Александр Тимофеевич, Левченко Елена Владимировна*  
*Воронежский Государственный Технический Университет*

*Левченко Елена Владимировна*  
*[ellevchenko@vmail.ru](mailto:ellevchenko@vmail.ru)*

Хотя металлические стекла обладают уникальным набором механических свойств, механизмы их деформации, течения и разрушения остаются до конца неизученными. Известно, что при комнатных температурах металлические стекла деформируются путем образования областей сдвига, где пластическая деформация локализована в полосы макроскопической длины толщиной несколько нанометров. При таких видах нагрузки как сжатие и изгиб на кривой напряжение-деформация в области пластической деформации обнаруживаются «зигзаги», при этом каждому отдельному прерывистому интервалу соответствует деформация по отдельной полосе сдвига [1 и др.]. Эта особенность наблюдается для множества стекол различного состава и является общим для данного класса материалов. Внутри полосы сдвига выделяют более малые единицы пластичности - так называемые зоны сдвиговых превращений (ЗСП), представляющие собой кластеры из ~ 10-50 атомов. Таким образом, для выяснения физической природы пластической деформации металлических стекол необходимым является раскрытие механизмов атомных перестроек в ЗСП. В настоящее время единственным источником такой информации является компьютерное моделирование на атомном уровне с использованием адекватных потенциалов межатомного взаимодействия [2,3 и др.].

Недавно несколько групп исследователей [4-6] независимо друг от друга получили массивные металлические стекла в двойной системе Cu-Zr. Обнаружено, что для наиболее легко аморфизирующегося сплава  $Cu_{64}Zr_{36}$  не выполняется ни один из известных эмпирических критериев стеклования. Таким образом, сплав  $Cu_{64}Zr_{36}$  может служить идеальным объектом для теоретических исследований фундаментальных проблем физики аморфного состояния, поскольку он наряду с хорошей стеклообразующей способностью (как у многокомпонентных массивных металлических стекол) обладает простой, характерной для бинарных сплавов корреляцией в цепочке “состав-структура-свойство”.

В данной работе представлены результаты молекулярно - динамического (МД) моделирования одноосного сжатия с постоянной скоростью  $3.3 \times 10^8 \text{ c}^{-1}$  вдоль оси  $Z$  с шагом 0.05% массивного металлического стекла  $Cu_{64}Zr_{36}$  с использованием многочастичных потенциалов, рассчитанных в рамках метода погруженного атома. Модель содержала 10000 атомов в основном кубе с периодическими граничными условиями. Методика МД расчета состояла в численном интегрировании уравнения движения с временным шагом  $\Delta t = 1.5 \times 10^{-15} \text{ c}$  по алгоритму Верле. На каждом шаге деформации вначале моделировалось однородное упругое смещение каждого атома, далее производился МД отжиг при 300 К, после чего систему методом статической релаксации переводили в состояние с  $T=0 \text{ K}$ , предоставляя возможность атомам занять равновесные положения в локальных потенциальных ямах.

Для выявления носителей пластической деформации сравнивали конечные координаты каждого атома с его положением после упругого однородного сжатия. Данный анализ позволил выявить атомы, которые после МД-релаксации испытали наибольшие смещения, значительно превышающие упругие. Обнаружено, что носителями пластической деформации являются локализованные в пространстве группы атомов, которые образуют ЗСП, расположенные под углом ~  $45^\circ$  к оси сжатия. Более того, установлено, что пики на кривой зависимости числа атомов-участников пластической деформации от величины деформации хорошо коррелируют с наблюдаемыми флуктуациями на кривой напряжение-деформация.

Проведенный тензорный анализ показал, что наиболее известный критерий микропластичности - критерий Мизиса – в случае деформации массивных металлических стекол не применим, т.е. не позволяет выявить потенциальных участников пластической деформации.

Отметим, что плотность построенной МД модели сплава, коэффициент Пуассона, модуль Юнга и предел текучести практически совпадают с экспериментальными данными [4,6,7].

Проведенный статистико-геометрический анализ на основе многогранников Вороного показал, что 6.1% атомов модели имеют координационный многогранник - икосаэдр. Из результатов наших предыдущих работ [8,9] мы можем заключить, что перколяционный кластер из взаимопроникающих и контактирующих икосаэдров образуется, когда более 6% атомов системы имеет икосаэдр в качестве координационного



многогранника. Кластер из несовместимых с трансляционной симметрией икосаэдров играет роль связующего каркаса, который препятствует кристаллизации и объясняет хорошую стеклообразующую способность данного сплава.

Список публикаций:

- [1] Donovan P.E., *Mater Sci Eng.*, **98**, 481(1988).
- [2] Srolowitz D., Vitek V., Egami T., *Acta Met*, **31**, 335 (1983).
- [3] Falk M.L., *Phys.Rev. B*, **110**, 4593 (1999).
- [4] D.Xu, B. Lohwongwatana, G.Duan, W.L. Johnson, C. Garland, *Acta Mat. in press* (2004).
- [5] D.Wang, Y.Li, B.B.Sun, M.L.Sui, K.Lu, E.Ma, *Applied Physics Let*, **84**, 20, 4029 (2004).
- [6] A.Inoe, W. Zhang, *Trans; JIM* **45**, 584 (2004).
- [7] Davis L.A. Chou C.P., Tanner L.E., Ray R, *Scripta Metall*, **10**, 937(1976).
- [8] Евтеев А.В., Косилов А.Т. Левченко Е.В., *Письма в ЖЭТФ*, **76**, 2, 115-117(2002).
- [9] Евтеев А.В., Косилов А.Т. Левченко Е.В., *ЖЭТФ*, **126**,3, 600-608, (2004).

## **Модификация гетероконтакта AgBr/AgCl посредством введения примесных ионов $[\text{IrCl}_6]^{3-}$**

**Дягилев Денис Владимирович**

*Титов Федор Вадимович, Бодак Ксения Александровна, Владимиров Александр Александрович  
Кемеровский Государственный Университет*

*Сечкарев Борис Алексеевич, д.х.н.*

[sechkar@kemsu.ru](mailto:sechkar@kemsu.ru)

Гетероконтактные микрокристаллы (МК) AgHal имеют ряд преимуществ по сравнению с однородными по галогенидному составу МК. Однако применяемые схемы построения гетероконтактных МК AgHal не достигают возможного значения эффективности использования поглощенного излучения. Это связано с наличием в месте гетероконтакта двух различающихся по галогенидному составу фаз энергетического барьера.

Изгиб энергетических зон в области гетероконтакта снижает эффективность направленной трансляции фотоиндуцированных носителей зарядов и увеличивает вероятность процессов рекомбинации электронов и дырок в области гетероконтакта. Особенно интенсивно эти процессы протекают при больших интенсивностях падающего света. Оптимизировать фотографический процесс в таких системах возможно модернизацией гетероперехода путем введения в кристаллическую решетку AgHal примесных ионов.

Настоящая работа посвящена исследованию влияния примесных ионов  $[\text{IrCl}_6]^{3-}$  на протекание фотопроцессов в гетероконтактных изометрических МК AgBr/AgCl

Изготовление галогенидосеребряных эмульсий проводилось способом контролируемой двухструйной кристаллизации. В реактор, содержащий требуемое количество водно-желатинового раствора, при постоянном перемешивании подавались растворы KHal и  $\text{AgNO}_3$ . В процессе синтеза регулировались температура, концентрация ионов  $[\text{Hal}]$ , скорость подачи растворов реагентов. Раствор, содержащий, в необходимой концентрации, ионы  $[\text{IrCl}_6]^{3-}$  вводили в различные моменты синтеза, обеспечивая заданную локализацию в микрокристалле. Минимальный объем вводимого раствора  $\text{K}_3[\text{IrCl}_6]$  составлял не менее 0,5% от общего объема эмульсии. По завершении процесса синтеза, эмульсии промывали от растворимых солей, приводили значения pH к оптимальным для процесса сенсibilизации. После чего проводили сернисто-золотую сенсibilизацию эмульсии, поливали на триацетатную основу и подвергали сенситометрическим испытаниям.

Известно, что при контакте фаз с различной структурой решеток образуется большое число дислокаций. Одной из таких систем являются гетероконтактные микрокристаллы AgBr/AgCl. Дислокации вдоль гетероконтакта способны заряжаться положительно, т.к. происходит трансляция дырок из AgCl фазы к гетероконтакту и возможно служат ловушками для электронов. Кроме того, происходит снижение эффективности процесса рекомбинации, т.к. происходит пространственное разделение фотоэлектронов и дырок. Граница гетероконтакта в таких МК может служить эффективным центром образования скрытого изображения. Однако процессы рекомбинации фотоиндуцированных носителей заряда на границе раздела фаз исключать нельзя. Поэтому представляется интересным исследовать влияние ионов  $[\text{IrCl}_6]^{3-}$  на протекание фотопроцесса в гетероконтактных МК AgBr/AgCl.

На (рис. 1 а) приведена зависимость относительной светочувствительности от времени экспозиции для таких систем.

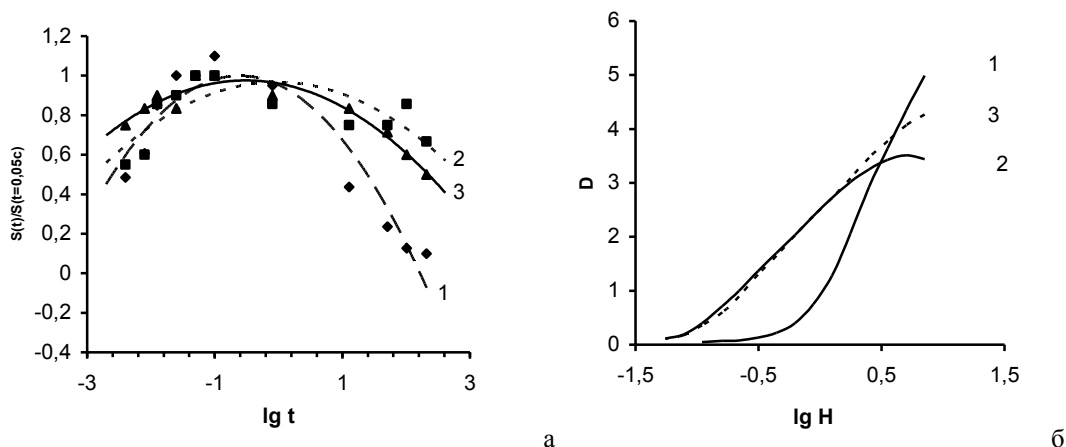


рис. 1. Относительная светочувствительность, для различного времени экспонирования (а) и характеристические кривые (б) эмульсионных слоев содержащих: 1 - AgBr {100}; 2 - эмульсионных слоёв с МК AgBr {100} с эпитаксами AgCl; 3 - эмульсионных слоёв с эпитаксиальными МК AgBr/AgCl допированными ионами  $[IrCl_6]^{3-}$

Из (рис. 1 а) видно, что для эпитаксиальных систем AgBr/AgCl снижение чувствительности в области  $lgt > 0$  менее интенсивно, чем для кубических МК AgBr. Возможно, область гетероконтакта служит эффективным центром концентрирования продуктов фотолиза, исключая или замедляя процессы термического распада мельчайших частиц фотолитического серебра.

Из-за различия в энергиях дна зоны проводимости и потолка валентной зоны между фазами AgBr и AgCl возможны процесс трансляции дырок. Благодаря этому происходит пространственное разделение электронов и дырок в зоне гетероконтакта. Это в свою очередь приводит к уменьшению вероятности рекомбинации фотоиндуцированных носителей зарядов. В области малых выдержек наклон кривой относительной чувствительности не изменяется. Введение допанта в область гетероконтакта приводит к уменьшению наклона кривой чувствительности в области  $lgt < 0$ , и увеличению максимальной оптической плотности (рис.1 б).

Благодаря иридиевым центрам увеличивается время жизни электронов в зоне проводимости до времен необходимых для образования центров скрытого изображения. Движение дырки существенно замедляется, благодаря чему электронно-ионные процессы образования скрытого изображения могут завершиться раньше, чем дырка продиффундирует к месту образования центра скрытого изображения.

## Молекулярно-динамическое моделирование ориентированной кристаллизации пленочной гетеросистемы Cu/Ni(111)

*Жиляков Дмитрий Геннадьевич*

*Евгеев Александр Викторович, Михайлов Евгений Александрович*

*Воронежский Государственный Технический Университет*

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

*[dimitrihouse@mail.ru](mailto:dimitrihouse@mail.ru)*

В настоящей работе проведено молекулярно-динамическое моделирование структурных и субструктурных превращений пленки Cu на поверхности монокристаллической подложки Ni ориентации (111) при кристаллизации из аморфного состояния. Размерное несоответствие  $f_0$  параметров кристаллических решеток Cu и Ni составляет 0,027. Подложку моделировали в виде расчетной ячейки, состоящей из 8 атомных слоев, в каждом из которых находилось 896 атомов. В направлениях  $[101]$  и  $[121]$  на систему накладывали периодические граничные условия. Три нижних слоя у дна расчетной ячейки являлись статическими, пять последующих - динамическими. Для формирования аморфной пленки Cu на поверхности подложки случайным образом размещали 8960 атомов. После проверки расстояний между ними поэтапно устраняли наиболее сильные перекрытия. Затем проводилась статическая релаксация системы. Взаимодействие между атомами описывали с использованием многочастичных потенциалов, рассчитанных в рамках метода погруженного атома. Далее атомам Cu и атомам Ni в динамических слоях сообщали начальные скорости в соответствии с распределением Максвелла при температуре 50 К и производили изохронный нагрев системы методом молекулярной динамики с шагом 50 К. Методика молекулярно-динамического расчета состояла в численном интегрировании уравнений движения атомов с временным шагом  $\Delta t = 1,5 \times 10^{-15}$  с по алгоритму Верле. Циклическая процедура нагрева сводилась к ступенчатому повышению температуры на  $\Delta T = 50$  К ( $T_i = i \times \Delta T$ , где  $T_i$  - температура "окружающей среды" на  $i$ -м - цикле), поддержанию этой температуры в системе на протяжении  $1000 \times \Delta t$  и последующему отжигу в адиабатических условиях в течение  $19000 \times \Delta t$ . Таким образом,

продолжительность одного цикла составляла  $20000 \times \Delta t$  или  $3 \times 10^{-11}$  с. После каждого цикла систему методом статической релаксации переводили в состояние с  $T=0$  К, предоставляя возможность атомам занять равновесные положения в локальных потенциальных ямах. Такая процедура позволяла провести детальный анализ формирующихся в процессе нагрева атомных конфигураций без теплового фона.

В интервале температур  $0 \div 50$  К произошла кристаллизация пленки Cu, о чем свидетельствует скачкообразное изменение потенциальной энергии системы, характерное для фазового перехода первого рода. Анализ функции радиального распределения атомов (см. рис. 1) и проекции трех соседних атомных плоскостей, параллельных межфазной границе, (см. рис. 2) (черные точки – первый слой пленки, темно-серые круги – второй, светло-серые – третий) показал, что  $\sim 55\%$  атомов пленки Cu образует ГПУ фазу ориентации  $(0001)$ ,  $[\bar{2}110]$  ГПУ-Cu  $\parallel (111)$ ,  $[\bar{1}01]$  ГЦК-Ni (см. рис. 1), а остальные атомы Cu образуют ГЦК фазу параллельной ориентации. Соотношение количества ГЦК и ГПУ фаз изменяется по мере удаления от межфазной границы. Анализ одновременно трех соседних атомных плоскостей, параллельных межфазной границе, показал наличие в них дефектов упаковки.

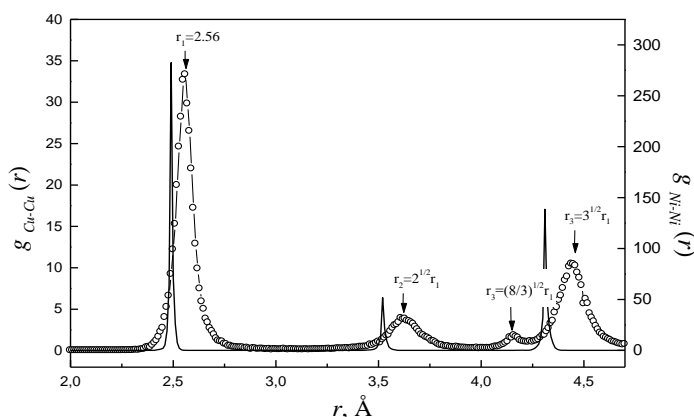


рис. 1

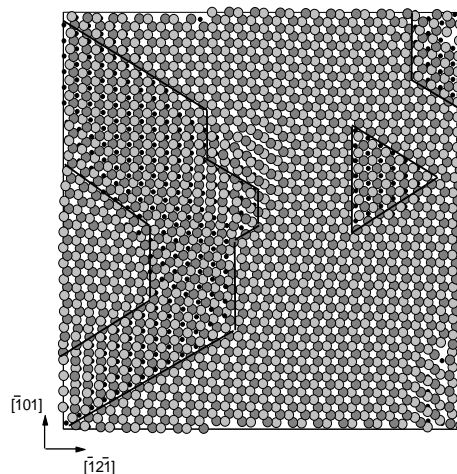


рис. 2

На стыках областей разной ориентации (сплошные линии) (см. рис. 2) расположены частичные дислокации Шокли, которые приводят к нарушению характерного для ГЦК решетки укладки слоев ABCABC и смене ее на BCBC. Эти структурные изменения обеспечивают частичную компенсацию упругих напряжений, вызванных размерным несоответствием.

Из анализа функции радиального распределения атомов пленки и подложки (см. рис. 1) видно, что атомы пленки испытывают сжатие в плоскостях, параллельных межфазной границе, что способствует образованию ГПУ фазы в пленке Cu. Сжимающие напряжения искажают атомные ряды, вследствие чего нижние слои пленки имеют сильную рельефную структуру. На межфазной границе в первом слое пленки обнаружены смещения атомов от равновесных положений в центрах мест адсорбции, причем в некоторых местах атомы располагаются на “перевалах”.

Процесс нагрева сопровождается существенным перераспределением дефектов, в результате чего плотность дислокаций несоответствия уменьшается, а доля ГПУ фазы в пленке растет.

## Молекулярно-динамическое моделирование ориентированной кристаллизации пленочной гетеросистемы Cu/Pd(110)

*Жияков Дмитрий Геннадьевич*

*Евтеев Александр Викторович, Старченко Артем Викторович*

*Воронежский Государственный Технический Университет*

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

*[dimitrihouse@mail.ru](mailto: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 Pd (110), изучены закономерности эволюции образовавшейся гетероструктуры в процессе изохронного отжига. Размерное несоответствие  $f_0$  параметров кристаллических решеток Cu и Pd составляет  $-0,07$ . Подложка моделировалась с помощью расчетной ячейки, состоящей из 8 атомных слоев, в каждом из которых находилось 900 атомов. В направлениях  $[001]$  и  $[\bar{1}10]$  на систему накладывались периодические граничные условия. Три нижних слоя (располагавшихся у дна расчетной ячейки) являлись статическими, пять последующих - динамическими. Для формирования аморфной пленки Cu на поверхности

подложки случайным образом размещали 9000 атомов, после чего проводилась статическая релаксация системы. Далее атомам Cu и атомам Pd в динамических слоях сообщали начальные скорости в соответствии с распределением Максвелла при температуре 50 К и производили изохронный нагрев системы методом молекулярной динамики с шагом 50 К. Методика МД расчета состояла в численном интегрировании уравнений движения атомов с временным шагом  $\Delta t = 1,5 \cdot 10^{-15}$  с по алгоритму Верле. Циклическая процедура нагрева сводилась к ступенчатому повышению температуры на  $\Delta T = 50$  К ( $T_i = i \times \Delta T$ , где  $T_i$  - температура "окружающей среды" на  $i$ -м - цикле), поддержанию этой температуры в системе на протяжении  $1000 \times \Delta t$  и последующему отжигу в адиабатических условиях в течение  $19000 \times \Delta t$ . Таким образом, продолжительность одного цикла составляла  $20000 \times \Delta t$  или  $3 \times 10^{-11}$  с. После каждого цикла систему методом статической релаксации переводили в состояние с  $T = 0$  К, предоставляя возможность атомам занять равновесные положения в локальных потенциальных ямах. Такая процедура позволяла провести детальный анализ формирующихся в процессе нагрева атомных конфигураций без теплового фона.

На температурной зависимости потенциальной энергии  $U_0$  наблюдается характерный для фазового перехода первого рода скачок. Это свидетельствует о кристаллизации аморфной пленки меди в температурном интервале от 0 до 50 К. Анализ субструктуры пленки после кристаллизации был проведен путем построения проекций межфазной границы системы Cu/Pd(110) (см. рис. 1) и атомных плоскостей (110) (см. рис. 2) (масштаб рисунка в направлении [110] увеличен в 4 раза; статические слои не показаны) и (001) при 50 К. На основе анализа функции радиального распределения атомов и межфазной границы было установлено, что ГЦК Cu имеет параллельную ориентацию (110),  $[\bar{1}10]$  Cu || (110),  $[\bar{1}10]$  Pd. Замечено также, что произошел обмен местами семи атомов пленки и подложки в температурном интервале 0÷50 К (см. рис. 1). Обнаружено увеличение количества атомов в плотноупакованных направлениях [110] на межфазной границе.

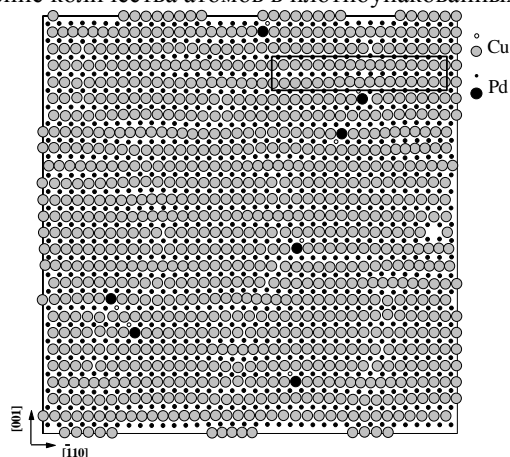


рис. 1

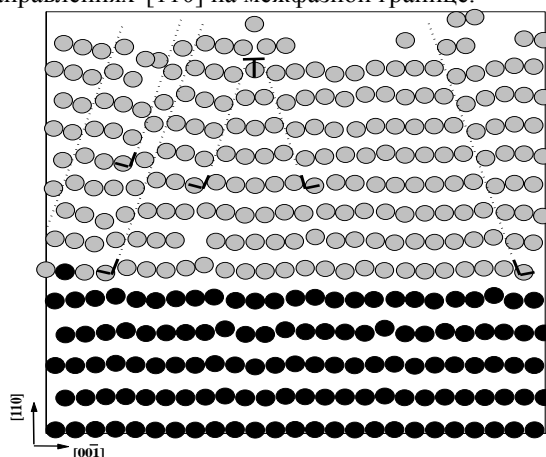


рис. 2

Анализ дефектной структуры тонкой пленки Cu на Pd (110) показал: релаксация упругих напряжений, вызванных размерным несоответствием в данной системе в направлении (001), происходит путем образования дефектов упаковки в плоскостях {111} ограниченных частичными дислокациями Шокли, вершинными дислокациями и свободной поверхностью (см. рис. 2) (пунктирные линии указывают места расположения дефектов упаковки), а в направлении  $[\bar{1}10]$  – более плотной упаковкой атомов и «нониусным» распределением их в долинах подложки Pd. На 36 мест адсорбции приходится 37-39 атомов меди (см. рис. 1) (Линиями выделена одна из областей, содержащая лишние атомы).

## Влияние размеров зерен на ионную проводимость и химическую диффузию в суперионных фазах халькогенидов меди

**Зиннуров Ильнур Биктимирович**

*Баймурзина Найля Ахтямовна*

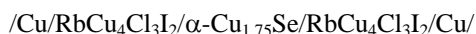
*Башкирский Государственный Университет*

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

*[Biktimirovich@mail.ru](mailto:Biktimirovich@mail.ru)*

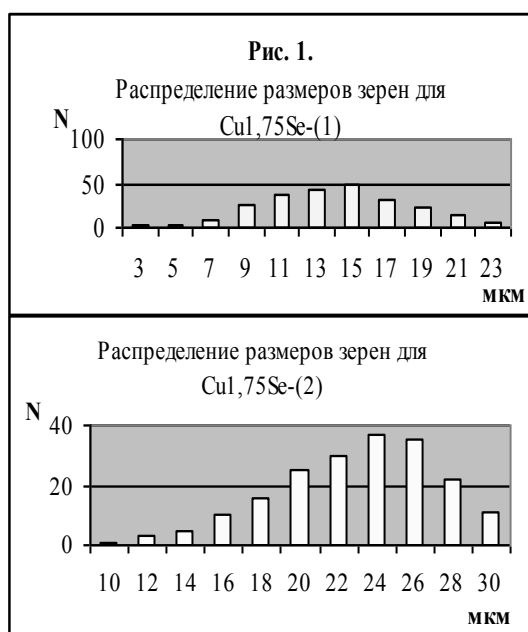
В данной работе исследовался ионный перенос в образцах  $\text{Cu}_{1.75}\text{Se}-1$  со средним значением размера зерна 15 мкм и  $\text{Cu}_{1.75}\text{Se}-2$  средним значением среднего размера зерна 25 мкм, (Рис. 1) в интервале температур от 140 до 240<sup>0</sup>С. Размер зерен для образцов  $\text{Li}_{0.25}\text{Cu}_{1.75}\text{Se}$ ,  $\text{Li}_{0.25}\text{Cu}_{1.75}\text{S}$  составлял, -18 и 100 мкм соответственно.

Поскольку исследуемые сплавы имеют преобладающую электронную проводимость, для подавления электронной составляющей тока в образце использовалась ячейка типа



(I)

с твердым электролитом  $\text{RbCu}_4\text{Cl}_3\text{I}_2$ , имеющим униполярную проводимость по ионам меди в интервале 140-240°C.

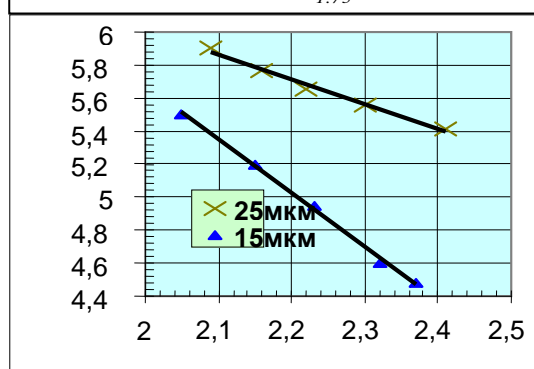


диффузии” связывают промежуточные (внутри тетраэдрических пустот) позиции  $32f_1$ , по которым статистически распределены подвижные катионы, через смежные с ними промежуточные (внутри октаэдрических пустот) позиции  $32f_2$ . Число возможных для занятия тетраэдрических позиций в элементарной ячейке намного превосходит число подвижных катионов. Энергия активации передвижения катионов по тетраэдрическим позициям очень мала и составляет 0.14 - 0.18 эВ в зависимости от нестехиометрии образца, поэтому даже при низких температурах  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  демонстрирует высокую ионную проводимость. На границах зерен каналы обрываются, это затрудняет диффузию катионов, поэтому сопротивление зернограничной области для  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  выше, чем в объеме зерна. В  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  по нашему мнению, энергия активации зернограничной диффузии и диффузии по объему примерно одинакова.

**Таблица 1.** Зависимость энергии активации ионной проводимости, химической диффузии и предэкспоненциальный фактор проводимости от среднего размера зерна для сплавов  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$

$d, \mu\text{m}$	15	25
$E_{a\sigma}, \text{eV}$	$0,17 \pm 0,01$	$0,13 \pm 0,01$
$\sigma_{i0}, \text{Scm}^{-1}\text{K}$	14600	8400
$E_{aD}, \text{eV}$	$0,22 \pm 0,03$	$0,25 \pm 0,03$

**Рис. 2.** Зависимость ионной проводимости от температуры при разных размерах зерен для  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$



зерен вызвано тем, что в химической диффузии кроме катионов участвуют также электронные дырки.

Ионную проводимость вычисляли по формуле:

$$\sigma_i = \frac{I * L}{\Delta U_{ii} * S} \quad (1)$$

где  $L$ -расстояние между двумя ионными зондами состава  $\text{Cu}/\text{RbCu}_4\text{Cl}_3\text{I}_2/$ ,  $I$ -сила тока (2 мкА),

$\Delta U_{ii}$ -разность потенциалов между ионными зондами,  $S$  -площадь сечения образца.

Из временной зависимости  $\Delta U_{ii}(t)$  разности потенциалов между ионными зондами при спаде концентрационной поляризации после выключения тока через ячейку ( $I$ ) определялся коэффициент химической диффузии  $D$  по формуле:

$$D = L^2 * \text{tg} \alpha / \pi^2$$

где  $L$  – длина образца,  $\text{tg} \alpha$  – тангенс угла наклона прямой  $\text{Ln}(\Delta U_{ii}) = f(t)$ ;

Ионная проводимость  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  заметно растет с ростом размера зерен, что говорит о преобладании ионной проводимости по объему, а не по границе зерна. Диффузия ионов в суперионном селениде меди происходит по так называемым “каналам быстрой диффузии”. Каналы «быстрой

диффузии” связывают промежуточные (внутри тетраэдрических пустот) позиции  $32f_1$ , по которым статистически распределены подвижные катионы, через смежные с ними промежуточные (внутри октаэдрических пустот) позиции  $32f_2$ . Число возможных для занятия тетраэдрических позиций в элементарной ячейке намного превосходит число подвижных катионов. Энергия активации передвижения катионов по тетраэдрическим позициям очень мала и составляет 0.14 - 0.18 эВ в зависимости от нестехиометрии образца, поэтому даже при низких температурах  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  демонстрирует высокую ионную проводимость. На границах зерен каналы обрываются, это затрудняет диффузию катионов, поэтому сопротивление зернограничной области для  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  выше, чем в объеме зерна. В  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  по нашему мнению, энергия активации зернограничной диффузии и диффузии по объему примерно одинакова.

По полученным нами результатам, при замещении меди литием ионная проводимость селенида меди резко уменьшается. За ионную проводимость  $\text{Cu}_2\text{Se}$  отвечают катионы меди наиболее слабо связанные с кристаллической решеткой, концентрация которых составляет 1/8 часть от общего числа катионов. Согласно структурным данным, в  $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  ионы лития занимают только октаэдрически координированные селеном позиции  $32f_2$  в кристаллической решетке, перекрывая каналы ионной проводимости в объеме зерна. Сопротивление ионному току в объеме зерна

становится больше по сравнению с сопротивлением зернограничной области, и в  $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  наблюдается обратная картина по отношению к  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  – ионная проводимость снижается с ростом размеров зерен, т.е. наблюдается преобладание зернограничной диффузии над диффузией по объему зерна.

Ионная проводимость для образца  $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{S}$  с крупнозернистой структурой (средний размер зерен  $\approx 100 \mu\text{m}$ ) на порядок меньше, чем у образцов  $\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  мелкозернистой структуры, со средним размером зерен  $\approx 17 \mu\text{m}$ . Ионный перенос в  $\text{Li}_{0,25}\text{Cu}_{1,75}\text{Se}$  осуществляется, по-видимому, по зернограничной прослойке. Увеличение размера зерен уменьшает относительную долю межграничных поверхностей в общем объеме образца и приводит к снижению ионной проводимости.

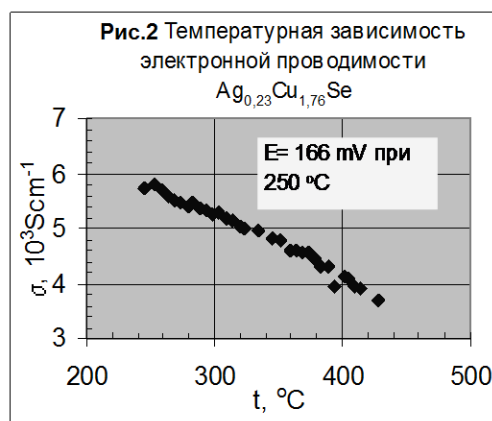
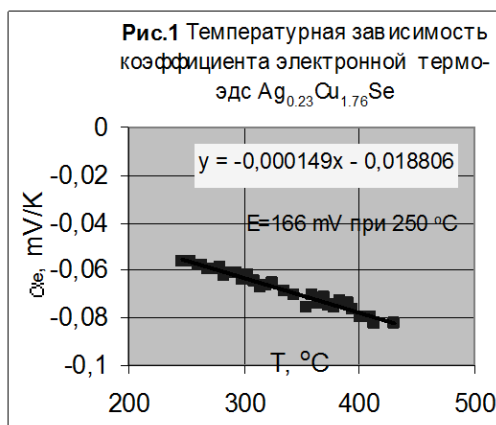
Отличие в поведении ионной проводимости и коэффициента химической диффузии при изменении размера

**Термо-эдс и электронная проводимость в нестехиометрических сплавах  $Ag_{0,23+\delta}Cu_{1,75}Se$  и  $Ag_{1,2+\delta}Cu_{1,8}Se$**   
**Ишембетов Салават Раисович**  
*Башкирский Государственный Университет*  
 Балапанов Малик Хамитович, к.ф.-м.н.  
[ishembetovsr@mail.ru](mailto:ishembetovsr@mail.ru)

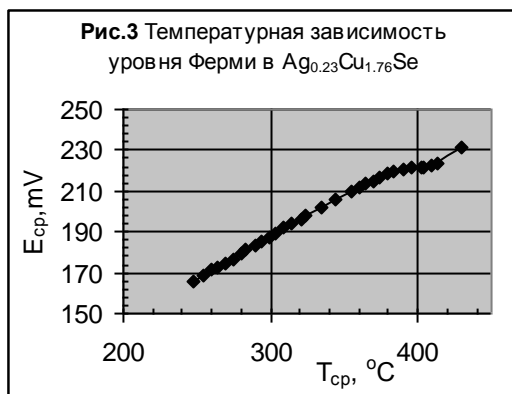
В данной работе исследуется электронная проводимость и термо-эдс нестехиометрических твердых растворов селенида меди и селенида серебра, существующих на основе ГЦК-фазы  $Cu_2Se$ . Известно, что селенид меди  $Cu_{2-\delta}Se$  является полупроводниковым соединением p-типа, в котором вакансии меди играют роль акцепторной примеси. При увеличении содержания серебра в твердом растворе  $Ag_2Se$  в  $Cu_2Se$  может иметь место смена типа электронной проводимости при вариации состава в пределах области гомогенности. Чтобы исследовать это интересное явление, было предпринято измерение электрофизических свойств твердых растворов  $Ag_{0,23+\delta}Cu_{1,76}Se$  и  $Ag_{1,2+\delta}Cu_{1,8}Se$  в зависимости от состава и температуры.

Благодаря смешанному электронно-ионному типу проводимости в данных соединениях и сильной разупорядоченности катионной подрешетки э.д.с.  $E$  электрохимической ячейки типа  $Ag/AgI/Ag_{1,2}Cu_{0,8}Se/C$  представляет собой высоту уровня Ферми  $\mu$  в образце относительно уровня Ферми  $\mu_{Ag}^0$  в металлическом серебре. Это позволило исследовать электронные свойства соединений непосредственно от положения уровня Ферми.

Измерения показали, что "холодный" конец образца  $Ag_{0,23+\delta}Cu_{1,76}Se$  имеет более положительный потенциал по отношению к "горячему" для всех составов и температур, т.е. коэффициент электронной термо-эдс имеет положительный знак. Таким образом, основными носителями тока в  $Ag_{0,23}Cu_{1,76}Se$  являются электронные дырки. На рис.1,2 видно, что коэффициент электронной термо-эдс  $Ag_{0,23+\delta}Cu_{1,76}Se$  линейно растет, а электронная проводимость почти линейно падает с ростом температуры, что характерно для металлов и сильно вырожденных полупроводников.



На рис.3 представлена температурная зависимость уровня Ферми относительно его положения в металлическом серебре. В интервале от 250 до 400 гр С наблюдается линейный рост уровня Ферми, около 400 гр С небольшая аномалия может объясняться фазовым переходом в ионном фильтре  $AgI$ . Электронная проводимость имеет высокие значения (выше  $10^3$  S/cm).



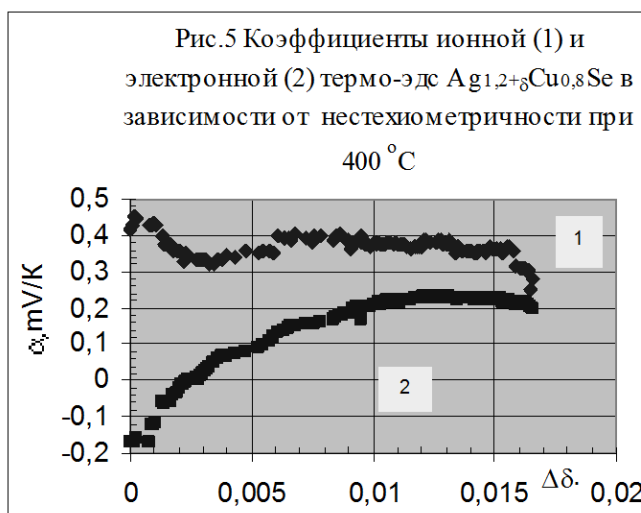
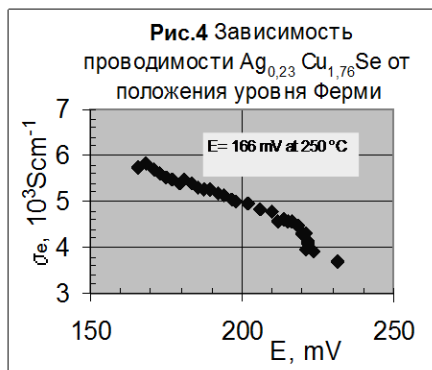
На рис.4 показана зависимость электронной проводимости  $Ag_{0,23}Cu_{1,76}Se$  от изменения уровня Ферми при нагревании от 250 до 430 °C. По падению проводимости, осуществляемой в основном дырками, можно констатировать, что с ростом температуры уровень Ферми движется из валентной зоны в сторону зоны проводимости.

В  $Ag_{1,2+\delta}Cu_{0,8}Se$  наблюдалось изменение типа электронной проводимости при вариации содержания серебра. Это подтверждается сменой знака электронной термо-эдс в  $Ag_{1,2+\delta}Cu_{0,8}Se$  (рис.5). Из рис.5 видно, что изменение знака термо-эдс происходит при введении  $\Delta\delta \approx 0,004$  серебра в исходный состав. Мы считаем, что изменение типа проводимости обусловлено изменением механизма дефектообразования. Соединение является

двусторонней фазой, т.е. может существовать как с недостатком металла, так и с избытком металла

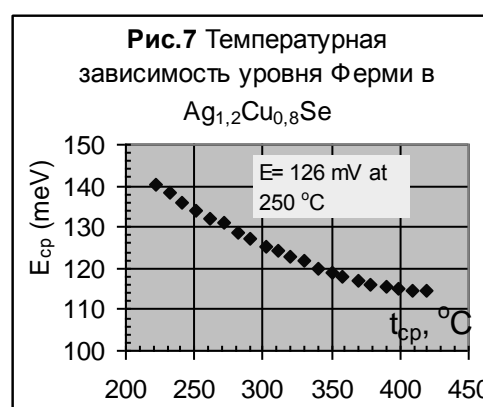
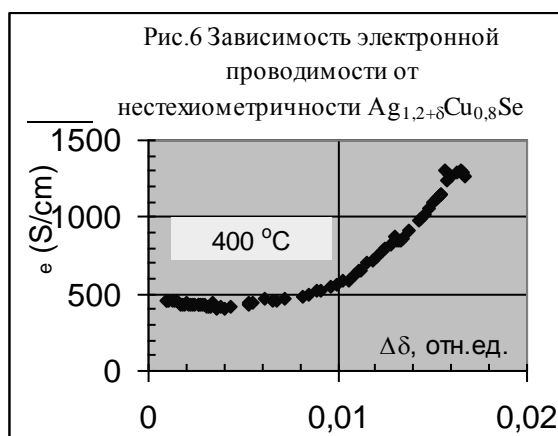
относительно стехиометрического состава. По нашей оценке при 400 °C ширина области гомогенности с избытком металла приблизительно составляет  $\Delta\delta \approx 0,012$ . Дальнейшее введение серебра приводит к выделению металла в виде второй фазы, при этом эдс ячейки E остается постоянной.

Стехиометрическому составу должна соответствовать точка перегиба на кривой титрования E( $\delta$ ). При стехиометрическом составе имеет место минимум коэффициента ионной термо-эдс (рис.5).



Согласно теории стехиометрическому составу при двусторонней области гомогенности должен соответствовать минимум электронной проводимости. Такой минимум виден на рис.6 около  $\Delta\delta = 0,004$ . При полной ионизации дефектов наклон зависимости  $\sigma_e$  ( $\delta$ ) определяется подвижностью носителей. Из рис.6 по наклону кривой в дырочной и электронной области проводимости видно, что подвижность электронов намного превышает подвижность дырок. Подвижность электронов вначале растет с повышением содержания серебра в фазе до  $\Delta\delta = 0,010$ , затем становится постоянной.

Коэффициенты электронной и ионной термо-эдс  $Ag_{1,2+\delta}Cu_{0,8}Se$  почти линейно уменьшаются с ростом температуры. На рис.7 показано изменение положения уровня Ферми при постоянном составе при изменении температуры от 240 до 440 °C.



**Выводы.** Полученные результаты позволяют утверждать, что твердый раствор  $Ag_{1,2}Cu_{0,8}Se$  может существовать как с недостатком, так и с избытком серебра относительно стехиометрического состава. Твердый раствор  $Ag_{0,23-\delta}Cu_{1,75}Se$  существует только с недостатком металла.

## Преобладание близнецового процесса образования экситонов в AlGaAs при малых интенсивностях фотовозбуждения

Кожмякина Елена Владимировна

Ефанов А. В., Журавлев К. С., Кельнер В., Пашер Х.

Новосибирский Государственный Университет

Журавлев К.С. к.ф.-м.н.

[kozhenyayakina@gorodok.net](mailto:kozhenyayakina@gorodok.net)

Внутренние процессы формирования свободных экситонов и их энергетической и спиновой релаксации в трехмерных полупроводниках III-V до сих пор недостаточно хорошо изучены. В трехмерных полупроводниках обычно рассматриваются два процесса формирования экситонов: прямая фотогенерация горячих экситонов с одновременным испусканием LO-фононов, т.н. близнецовый механизм, и бимолекулярный процесс образования экситонов, при котором происходит случайное связывание электронов и дырок вследствие кулоновского взаимодействия. Процесс образования горячих экситонов по близнецовому механизму линеен по интенсивности накачки. Темп генерации бимолекулярных экситонов пропорционален вероятности взаимодействия между термализованными электроном и дыркой и поэтому пропорционален плотности состояний сгенерированных электронов и дырок. Из этого следует, что при низких мощностях накачки близнецовый процесс формирования экситонов оказывается более эффективным. Чтобы проследить механизмы формирования экситонов, были определены времена жизни экситонов в зависимости от мощности накачки. Для этого изучалась деполяризация фотолюминесценции (ФЛ) в магнитном поле, направление которого перпендикулярно лучу возбуждающего света (эффект Ханле) при различных мощностях накачки.

В работе исследовались высокочистые образцы  $Al_xGa_{1-x}As$  с содержанием алюминия  $x=0.15$ . Слои выращивались на установке Riber-32P с помощью метода молекулярно-лучевой эпитаксии на полуизолирующих подложках GaAs с ориентацией (100). Толщина слоев составляла 2.5 мкм. Для уменьшения поверхностной рекомбинации слои были покрыты буферными слоями AlAs толщиной 25 нм. Циркулярно поляризованная фотолюминесценция возбуждалась с помощью лазерного диода с длиной волны 670 нм.

При высоких мощностях накачки преобладала линия свободного экситона. При уменьшении мощности накачки появлялись линии связанных экситонов, которые начинали преобладать при мощностях порядка десятков нВт. Максимальная степень циркулярной поляризации наблюдалась на линии связанных экситонов и достигала значения 35% при низких уровнях возбуждения. Экситоны, образованные по бимолекулярному механизму, не могут давать такие высокие степени циркулярной поляризации, поэтому можно сделать вывод о том, что существует другой процесс, который дает основной вклад в ФЛ при низких уровнях возбуждения.

Кривые Ханле имеют сложную форму. Они представляют собой наложение двух контуров с ширинами, отличающимися приблизительно в 10 раз. Мы исходили из предположения, что узкий и широкий контуры

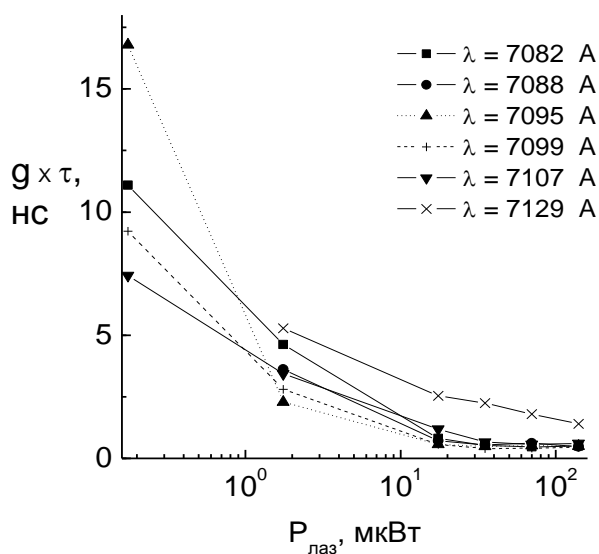


рис. 1

соответствуют экситонам, образовавшимся по бимолекулярному и близнецовому механизмам, соответственно [1]. С уменьшением интенсивности фотовозбуждения увеличивается степень циркулярной поляризации и меняется форма кривых Ханле: уменьшается ширина обоих контуров. Также меняется отношение амплитуд двух контуров: вклад узкого контура в ФЛ уменьшается и исчезает при интенсивностях фотовозбуждения порядка  $1 \div 0.1$  мкВт. Это подтверждает наше предположение о природе узкого контура.

Мы аппроксимировали кривые Ханле суммой двух функций Лоренца. В различных точках спектра ФЛ были определены времена жизни экситонов и их спинов. Мы предполагали, что начальная степень циркулярной поляризации составляет 25% для экситонов, образовавшихся по бимолекулярному механизму и 100% – для экситонов, образовавшихся по близнецовому механизму. Были определены времена жизни и релаксации спина, умноженные на g-фактор (рис. 1).

Из рис. 1 видно, что время жизни  $g \times \tau$  экситонов, образованных по бимолекулярному



механизму, с уменьшением интенсивности фотовозбуждения увеличиваются более чем в 10 раз. Время жизни экситонов, образованных по близнецовому механизму несколько увеличивается с ростом интенсивности фотовозбуждения.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 04-02-16774).

Список публикаций:

[1] Zhuravlev K. S., Efanov A. V., Kellner W. and Pascher H. 2002 *Physica B* **314** 305-8

## **Технология изготовления экспериментальных образцов преобразователей СВЧ мощности**

**Колесникова Анна Алексеевна**  
**Шербак Андрей Владимирович**  
*Самарский Государственный Университет*  
*abp@mail15.com*

Термическое окисление производится для формирования на кремниевой подложке слоя двуокиси кремния. В данной работе слой двуокиси кремния служит для избирательного выращивания пленки карбида кремния на кремниевой подложке. Карбид кремния растет только на свободных от окисла участках подложки. Если тип проводимости пленки SiC противоположен типу проводимости подложки, то в результате получаются электрически изолированные друг от друга области карбида кремния. Эти области и определяют топологию преобразователей СВЧ мощности.

Для получения тонких стабильных пленок двуокиси кремния используется окисление в атмосфере сухого кислорода. В данной работе окисление проводилось на воздухе при температуре 900 °С.

Для получения топологии преобразователей СВЧ мощности применялась фотолитография по окислу кремния. Перед нанесением фоторезиста подложка прогревалась в течение 5-10 мин при температуре 1000 °С в атмосфере сухого кислорода (воздуха). Для формирования защитного слоя использовался позитивный фоторезист ФП-9120 обеспечивающий получение пленки толщиной 0,3-0,5 мкм при нанесении методом центрифугирования со скоростью вращения 900 об/мин. Проявление изображения проводилось 0,6% растворе КОН при температуре 20±5 °С.

Выращивание карбида кремния проводилось по диффузной технологии. Толщина выращенной пленки карбида кремния определялась временем роста и находилась в пределах 2-3 мкм при времени роста 1-1,5 ч.

Формирование омических контактов к карбиду кремния является завершающей стадией изготовления образцов преобразователей СВЧ мощности. Методом испарения в вакууме на поверхность образца наносился слой никеля толщиной 0,2-0,3 мкм. Перед осаждением образцы нагревались до 300 °С.

Геометрия контактных площадок к преобразователям СВЧ мощности формировалась методом фотолитографии по никелю. Для формирования защитного рельефа также использовался фоторезист марки ФП-9120. Удаление никеля с незащищенных участков производилось в травителе на основе ортофосфорной, азотной и уксусной кислот. После этого образцы подвергались отжигу методом электронного нагрева в вакууме при температуре 900 °С.

Приготовленные образцы помещались о специальный участок волновода, имеющий посередине широкой стенки узкую щель, через которую образец вводился в электромагнитное поле СВЧ волны.

## **Определение параметров структуры координационного окружения титана в Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub> с помощью Ti K-XANES спектров**

**Кониурова Юлия Сергеевна**  
*Бугаев Лусеген Арменакович*  
*Ростовский Государственный Университет*  
*Бугаев Лусеген Арменакович*  
*Yulitsa-k@yandex.ru*

Соединение Li<sub>4</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>12</sub> широко используется в качестве материала электродов литиевых батарей. Часто применяющиеся в блоках питания ноутбуков, цифровых камер и других устройств литиевые батареи, по сравнению с другими подобными устройствами, более энергоёмки, способны работать с повышенным напряжением и значительно дольше удерживают заряд.

Электропроводность  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  существенно повышается при интеркаляции ионов в структуру кристалла. Чтобы усовершенствовать эти батареи в дальнейшем, необходимо в деталях выяснить, какие позиции занимают ионы Li при таком процессе.

При детальном изучении структуры кристалла обнаруживаются многочисленные вакансии для ионов Li, что объясняет высокую энергоёмкость таких соединений как  $\text{LiLi}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ ,  $\text{Li}_2\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ ,  $\text{Li}_3\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ . Были выдвинуты предположения относительно месторасположения и количества внедряемых ионов, а также относительно соответствующих изменений самой структуры

Для кристалла  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  теоретически исследуются механизмы формирования тонкой структуры рентгеновского K-спектра поглощения титана (Ti K-XANES). Выполнены прямые расчеты и Фурье-анализ, как полного спектра, так и отдельных вкладов в сечение поглощения от различных процессов рассеяния фотоэлектрона атомами в  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ . Установлено, что при выборе нижней границы интервала волновых чисел фотоэлектрона, используемого для Фурье-преобразования, выше первых краевых особенностей Ti K-XANES спектра, влияние вкладов процессов однократного рассеяния атомами второй и более далеких сфер, а также процессов многократного рассеяния, на определяемые величины межатомного Ti-O расстояния и координационного числа атома Ti, оказывается пренебрежимо малым. В рамках *многосферного* фитинга Фурье-пика атомов, координирующих атом титана, определены структурные параметры координационного окружения атома титана соединения  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  вплоть до 5 Å, что позволило использовать полученные результаты при изучении соединений  $\text{LiLi}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ ,  $\text{Li}_2\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ ,  $\text{Li}_3\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  и проверить предположения относительно расположения внедряемых ионов Li в этих соединениях.

## Методы вычисления интегральных характеристик зонного спектра

*Корабельников Дмитрий Васильевич*

*Кемеровский Государственный Университет*

*Журавлёв Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.*

*[zhur@kemsu.ru](mailto:zhur@kemsu.ru)*

В исследовании электронной структуры твердых тел и интерпретации экспериментальных данных важную роль играют интегральные величины, определяемые выражением вида

$$I(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int I(\vec{k}) \delta(E - E(\vec{k})) d\vec{k}, \quad (1)$$

где интегрирование выполняется по зоне Бриллюэна. К числу таких величин относятся: полная и парциальная плотности электронных состояний, комбинированная плотность состояний, вещественная и мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости. Существуют различные методы вычисления интегральных характеристик зонного спектра. К числу таких методов относятся методы тетраэдров и специальных точек.

Метод тетраэдров заключается в разбиении зоны Бриллюэна на тетраэдры и линейной интерполяции энергии по её значениям в вершинах тетраэдров. Это позволяет использовать лишь неприводимую часть зоны Бриллюэна и аналитически рассчитать интеграл (1) по зоне Бриллюэна.

Сущность метода специальных точек заключается в определении таких точек, которые дают основной вклад в плотность состояний. Это позволяет ограничиться расчетами в довольно малом количестве точек, которые и называются специальными. В интерполяционной схеме используются симметризованные ряды Фурье. Для численного вычисления интеграла (1) по зоне Бриллюэна применяются кубатуры Гаусса.

В данной работе методы тетраэдров и специальных точек рассматриваются на примере расчёта полной и парциальных плотностей электронных состояний. Вычисления проводились для бромида серебра (см. рис.2) с помощью программ, написанных на FPS 4.0. Бромид серебра широко используется в фотографии и существует много работ по исследованию его электронной структуры. Критерием точности расчётов служило соответствие теоретическим и экспериментальным результатам работ [1]-[3] ряда авторов и малость изменения плотности состояний с увеличением числа опорных точек. В хорошем согласии с работами [1]-[3], максимумы полной плотности состояний для  $\text{AgBr}$  соответствуют энергиям: -14.84, -4.58, -3.93, -3.00, -2.59, -1.40, -0.5, 3.63, 6.00, 7.75, 10.75 эВ. Максимальная полная плотность состояний сосредоточена в интервале от -5 до 0 эВ. Ширина запрещенной зоны составила 1.2 эВ. На рис.1 приведена полная плотность состояний, полученная в [2].

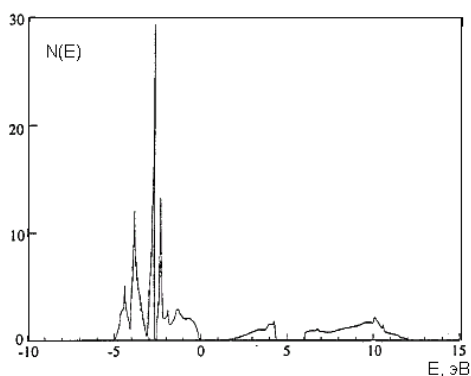


рис.1

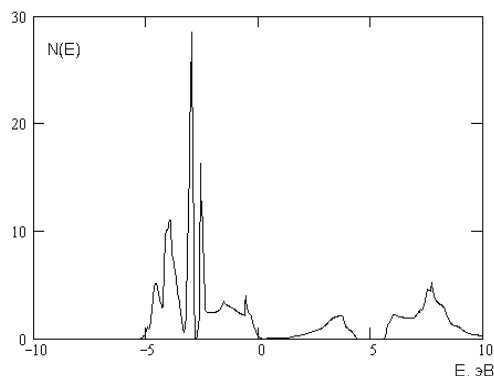


рис.2

По результатам работы можно сделать следующие выводы:

1. Плотность состояний, рассчитанная в настоящей работе, лучше всего согласуется с работами [1]-[3] в валентной зоне. Различие плотностей в зоне проводимости связано с различием методов расчёта энергии в опорных точках.
2. Метод тетраэдров даёт лучшие результаты при равномерном разбиении неприводимой части зоны Бриллюэна на тетраэдры.
3. Метод тетраэдров позволяет точнее метода специальных точек рассчитать плотность состояний за счёт возможности увеличения числа опорных точек в 48 (число элементов симметрии) раз.
4. Для расчёта плотности состояний с неплохой точностью целесообразно использовать метод тетраэдров с пятнадцатью опорными точками. Увеличение их числа в 2 раза приводит к смещению максимумов плотности состояний лишь на 1 %.

Список публикаций:

- [1] Mason M.G., Miller T.J., Brown F.C., Kunz A.B. *Phys. Rev. B.*, **42**, 2996-3003 (1990).  
 [2] Onwuagba B.N., *Solid state Communications*, **97**, 267-271 (1996).  
 [3] Oleshko V., Amkreutz M. and Overhof H., *Phys. Rev. B.*, **67**, 5409-5416 (2003)

## Влияние содержания и типов карбида кремния на структуру и дефектность кремнеземистой керамики

**Котляр Татьяна Анатольевна**

*Кыргызско-Российский Славянский Университет*

*Каныгина Ольга Николаевна, к.ф.-м.н.*

*[Kotlyar\\_Tanya@mail.ru](mailto:Kotlyar_Tanya@mail.ru)*

К числу перспективных основ для создания керамик относится глина Кара-Кече (Кыргызстан), имеющая состав: SiO<sub>2</sub> -66, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> -30, TiO<sub>2</sub> -1, Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> -1, CaO -0,3, MgO -1, K<sub>2</sub>O -1 мас. % [1]. В современной практике использования и промышленного получения керамик особо актуальной является задача поиска и определение факторов, обеспечивающих получение плотной микроструктуры керамик, а также разработка методов контроля качества, степени дефектности и прочностных характеристик получаемой керамик [1-4]. Глина Кара-Кече отличается невысокой теплопроводностью (менее 1 Вт/м·°C при 400°C) и, соответственно, невысокой технологичностью, поскольку требуется малая скорость нагрева и длительная выдержка при её спекании. Армируя кремнеземистую керамику прочными частицами, с высокой теплопроводностью, например, частицами карбида кремния SiC (теплопроводность ~42 Вт/м·°C при 400°C), можно изменить кинетику спекания и получить более однородную, прочную структуру. С этой целью нами проведены комплексные исследования процесса спекания и ряда структурных характеристик композиционного керамического материала на основе глины Кара-Кече. Анализ структуры и степени гомогенности, получаемых керамик, в зависимости от типа армирующей добавки и режимов спекания проводился с применением техники микроскопии и других структурно-чувствительных методов.

В наших экспериментах глина использовалась как матрица, в которой равномерно распределены тугоплавкие частицы. В качестве тугоплавких частиц активатора реакционного спекания использовались абразивные порошки карбида кремния SiC двух типов. Частицы карбида кремния I типа имели размеры 15±3 мкм, с пластинчатой формой. Частицы имели чёрный цвет и были полупрозрачны. Толщина пластинок была в 10 раз меньше среднего диаметра. Полиэдрические частицы карбида кремния II типа имели размеры 5±1 мкм и в три раза большую удельную поверхность по сравнению с частицами карбида I типа; они имели зелёный окрас. Содержание частиц карбида варьировалось от 10 до 25%. Для изучения влияния частиц карбида на прочность кремнеземистой керамики выбраны трехчасовые режимы спекания при температурах: 1050, 1200, 1300 и 1400°C. Качество спекания системы глина-карбид оценивалось по коэффициенту спекания,

отображающего такие характеристики, как пористость и коэффициент упаковки частиц твердой фазы, число пор и частиц, а также энергетическое состояние твердой фазы системы. Пористость образцов, как характеристика дефектности, определялась методом секущих [4]. Структура получаемой керамики изучалась с использованием растрового микроскопа Tesla BS-300 (Чехия). Прочность на сжатие, как параметр качества керамики, определялась по ГОСТ 24409-80 на образцах цилиндрической формы высотой и диаметром 10 мм. В качестве структурно-чувствительного параметра использовался модуль упругости.

Коэффициенты спекания существенно зависят от содержания в кремнеземистой керамике армирующих частиц SiC, а также от типа частиц и температуры спекания (рис. 1).

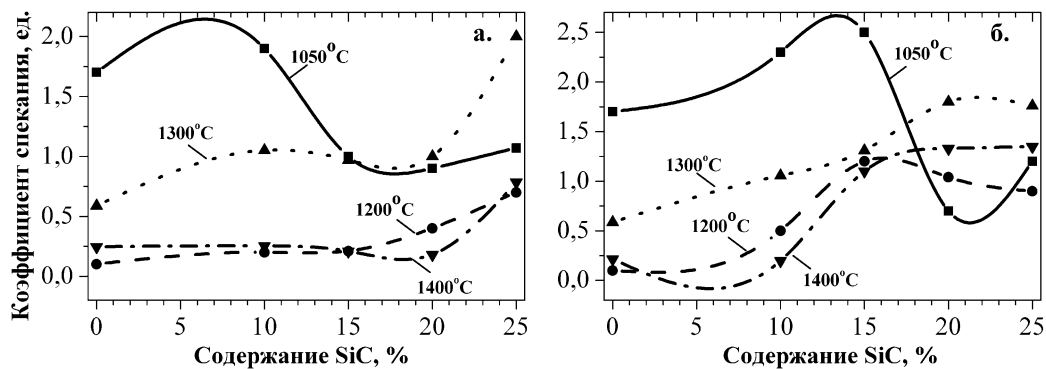


рис. 1. Коэффициенты спекания керамики, армированной частицами SiC: а – I типа, б- II типа.

Результаты микроскопических исследований, а также анализ различных прочностных и качественных характеристик полученных образцов керамики позволили установить основные особенности процессов спекания при различных условиях. Было установлено, что в области низких температур (до 1100°C) карбидные частицы аккумулируют энергию, образуя области локального разогрева окружающей матрицы, что приводит к снижению вязкости и способствует самоорганизации диссипативной структуры через упорядочение. При дальнейшем повышении температуры они играют роль стабилизаторов, способствуя выравниванию температурного поля в образце. Частицы карбида кремния II типа оказались более эффективны при всех режимах спекания. Образцы, содержащие 15-25% примеси карбида кремния II типа, обожженные при температурах 1300 и 1400°C, обладают высоким модулем упругости (до 320 МПа), а их структура характеризуется низкой пористостью. Уже 15% примеси карбида II типа достаточно для смещения всех физических процессов в область более высоких температур. Температурный режим 1300°C можно считать наиболее оптимальным для получения качественной, однородной прочной кремнеземистой керамики. Армирование позволяет в два раза повысить прочность кремнеземистой керамики.

Таким образом, на структуру полученной керамики оказывают влияние температура спекания, количество и тип карбида кремния. В системе глина-карбид с подводом тепла частицы карбида кремния разогреваются раньше матрицы за счет большей теплопроводности. Часть полученной энергии расходуется на полиморфные превращения карбидов, а остальная идет на дополнительный локальный разогрев кремнеземистой массы вокруг частиц SiC. Это приводит к образованию жидкофазных прослоек с малой вязкостью, которые улучшают смачиваемость и спекание армирующих частиц с матрицей.

#### Список публикаций

- [1] Жекишева С.Ж. Использование глин Кара-Кече. Илим. Бишкек (1994), 64с.
- [2] Лотов В.А., Алексеев Ю.И. Стекло и керамика. 1-2, 27-30 (1995).
- [3] Карбид кремния. Обзор. Гостехиздат УССР, Киев (1963), 315с.
- [4] Салтыков С.А. Стереометрическая металлография. Металлургия, М. (1970), 376 с.

## Поперечная магнитопроводимость сверхрешетки в условии штарковского квантования

**Кухарь Егор Иванович**

**Завьялов Дмитрий Викторович**

**Волгоградский Государственный Педагогический Университет**

**Крючков Сергей Викторович, д.ф-м.н.**

[sed@fizmat.vspu.ru](mailto:sed@fizmat.vspu.ru)

Целью работы являлся расчет поперечной магнитопроводимости полупроводниковой сверхрешетки (СР) в условиях квантующего электрического поля, а также исследование зависимости проводимости от напряженностей магнитного и электрического полей.

Рассмотрена СР, периодичная вдоль оси  $Oz$  с периодом  $d$ . Квантующие магнитное и электрическое поля направлены вдоль оси СР. Энергетический спектр электрона в таких условиях имеет вид

$$\varepsilon_{n\nu} = \hbar\Omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_{st}\nu, \quad (1)$$

где  $\Omega = \frac{e}{mc}H$  – циклотронная частота,  $\omega_{st} = \frac{ed}{\hbar}E$  – штарковская частота  $n = 0, 1, 2, \dots$ ,  $\nu = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ,  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  – векторы напряженностей электрического и магнитного полей соответственно.

Кроме того, предполагается, что вдоль оси ОХ приложено слабое электрическое поле.

Поперечная проводимость вдоль оси ОХ вычисляется по следующей формуле[1]:

$$\sigma_{xx} = \frac{2\pi e^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} \sum_{n\nu k_y} \sum_{n'\nu' k'_y} \left( -\frac{\partial f_{n'}}{\partial \varepsilon_{n'}} \right) \frac{\lambda^4}{2} (k_y - k'_y)^2 \left| \langle n\nu k_y | W | n'\nu' k'_y \rangle \right|^2 \delta(\varepsilon_{n\nu} - \varepsilon_{n'\nu'}), \quad (2)$$

где  $W = V_{\mathbf{q}} \cdot \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\hbar\Lambda^2}{2\rho s V q}} |\mathbf{q}| \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r})$  – оператор электрон-фононного взаимодействия,  $\rho$  – плотность

кристалла,  $s$  – скорость звука,  $\Lambda$  – константа деформационного потенциала,  $\lambda^2 = \frac{\hbar c}{eH}$ ,

$f_n = A \exp\left(-\frac{\hbar\Omega(n+1/2)}{\theta}\right)$  – функция распределения,  $A = \frac{2\pi m_0 d^3}{x} \operatorname{sh}\left(\frac{\beta x}{2\theta}\right)$ ,  $x = \frac{\hbar\Omega}{\beta}$ ,  $\beta = \frac{\hbar^2}{md^2}$ ,  $\theta$  – температура электронного газа, выраженная в энергетических единицах.

Таким образом, получаем выражение для поперечной магнитопроводимости СР.

$$\sigma_{xx} = \sigma_0 \sqrt{x} \left( 1 - \exp\left(-\frac{\beta}{2\theta}x\right) \right) S(x, z). \quad (5)$$

Здесь:

$$S(x, z) = \sum_{n=0}^{\infty} 2^n \int_{-\pi/2}^{+\pi/2} R_n(x, y) Q_n(x, y, z) dy, \quad (6)$$

$$R_n(x, y) = \frac{1}{n!} \Gamma\left(n + \frac{5}{2}\right) {}_1F_1\left(-\frac{1}{2}; -n - \frac{3}{2}; \frac{y^2}{x}\right) - \frac{n+1}{2\sqrt{\pi}} \Gamma\left(-n - \frac{5}{2}\right) \left(\frac{y^2}{x}\right)^{n+5/2} {}_1F_1\left(n+2; n + \frac{7}{2}; \frac{y^2}{x}\right), \quad (7)$$

$$Q_n(x, y, z) = \sum_{\gamma=-\infty}^{+\infty} J_{\gamma}^2\left(\frac{2\Delta \sin y}{\beta z}\right) \exp\left(-\frac{(xn + z\gamma)^2}{\alpha^2}\right), \quad y = \frac{q_z d}{2}, \quad \sigma_0 = \frac{4e^2 \Lambda^2 n_0 \tau}{\pi^{5/2} \theta d^2 \rho s \hbar},$$

$n_0$  – концентрация свободных электронов в полупроводнике. Численная оценка  $\sigma_0$  при следующих значениях параметров:  $d = 3 \cdot 10^{-6}$  см,  $\theta = 0.001$  эВ,  $\Delta = 0.01$  эВ, составляет  $\sigma_0 = 10^9$  с<sup>-1</sup> (ГСГ).

Выражение (5) для  $\sigma_{xx}$  исследовано нами на ЭВМ. Зависимость поперечной проводимости СР от напряженности магнитного поля при фиксированном значении напряженности электрического поля представлена на (рис.1). Зависимость поперечной проводимости СР от напряженности электрического поля при фиксированном значении напряженности магнитного поля представлена на (рис. 2).

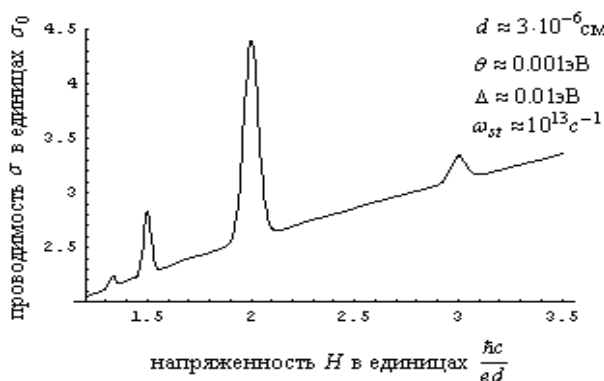


рис. 1

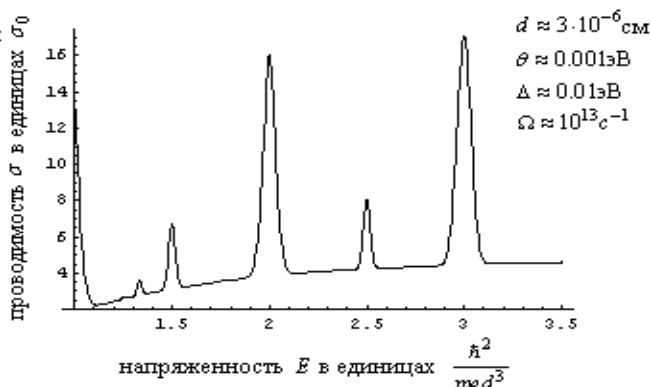


рис. 2

Работа поддержана грантом регионального конкурса АВО-РФФИ «Поволжье-2004» №04-02-96505.

## Исследование «запрещенных» брэгговских рефлексов в кристаллическом германии в области аномального рассеяния

Лемешко Михаил Петрович

Кривицкий Евгений Владиславович

Ростовский Государственный Университет

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

[vptv@narod.ru](mailto:vptv@narod.ru)

В начале 70-х годов прошлого века было обнаружено, что интенсивности дифракционных максимумов ведут себя странным образом при энергиях рентгеновских фотонов, близких к энергии ионизации одного из остовных уровней в веществе. Этот процесс получил название аномального или резонансного рассеяния.

Широкий интерес к этому явлению вызван тем, что в области аномального рассеяния атомная амплитуда рассеяния становится анизотропным тензором и в существенной степени зависит от геометрии ближнего окружения рассеивающих атомов, что открывает широкие возможности для исследования локальной атомной структуры твердых тел. Это влечет за собой как явления, хорошо известные в кристаллооптике видимого светового диапазона (дихроизм, двулучепреломление), так и явления, специфические только для рентгеновской области спектра. К числу последних и относится появление в области аномального рассеяния “структурно запрещенных” рефлексов. Один из механизмов возникновения «запрещенных» брэгговских рефлексов заключается в том, что амплитуды рассеяния различными атомами в элементарной ячейке, которые одинаковы в области нормального рассеяния, становятся различными в области аномального рассеяния. Этот эффект был впервые рассмотрен в работе Д. и Л. Темплтонов [1].

В случае кристалла германия ситуация несколько иная. Из-за высокой симметрии кристалла, в диполь-дипольном приближении амплитуды рассеяния различными атомами в элементарной ячейке одинаковы и в области аномального рассеяния. Но «запрещенные» рефлексы могут появиться благодаря вкладом в АФР от тензоров более высокого ранга, например, диполь-квадрупольных. Кроме того, «запрещенные» рефлексы могут возникать за счет тепловых колебаний атомов, нарушающих локальную симметрию кристалла. Такую анизотропию называют термоиндуцированной анизотропией (thermal-motion induced, TMI).

В данной работе было проведено исследование вкладов термоиндуцированного и диполь-квадрупольного механизмов в 006 брэгговский рефлекс в кристаллическом германии в области энергий фотонов, близких к К-краю поглощения германия.

Расчеты были выполнены одноэлектронным методом многократного рассеяния в формализме функций Грина. При расчете компонент тензора АФР использовался полуэмпирический МТ потенциал [2] с учетом остовой дырки, возникающей в промежуточном состоянии. При таком расчете в качестве параметров выбираются радиусы атомных сфер, внутри которых потенциал считается сферически симметричным, а также величина МТ–нуля, постоянного потенциала в областях между атомными сферами. Расчеты проводились с использованием комплекса программ, разработанных в Ростовском госуниверситете доц. А.А. Новаковичем [3]. Для расчета термоиндуцированного вклада были использованы корреляционные функции, найденные в дебаевском приближении в работе [4].

В ходе исследований было показано, что только при совместном учете как диполь-квадрупольного, так и термоиндуцированного механизмов возможно теоретически описать появление 006 «запрещенного» рефлекса в германии в области аномального рассеяния. Было получено хорошее согласие с экспериментом [5] как спектральной интенсивности рефлекса при комнатной температуре, так и ее температурной зависимости.

### Список публикаций:

1. D.H. Templeton and L.K. Templeton, *Acta Cryst., Sect. A: Found. Cryst.*, 36, 237, 1980
2. R.V. Vedrinski, V.L. Kraizman, A.A. Novakovich et al., *J. Phys: Condens. Matter*, 10, 9561-9580, 1998.
3. P.B. Ведринский, А.А. Новакович, *Физ. металлов и металловедение*, т.39, с.7, 1975
4. O.H. Nielsen and W. Weber. *Displacement correlations in covalent semiconductors J. Phys. C* 1980, V. 13, p. 2449.
5. A. Kirfel and J. Grybos, V.E. Dmitrienko, *Phys.Rev. B*, 66, 165202, 2002

## **Численный расчет зависимости температуры Кюри от формы затравочной плотности состояний в рамках теории Стонера**

**Манохин Пётр Владимирович**

*Анисимов Владимир Ильич*

*Уральский Государственный Технический Университет (УПИ)*

*Некрасов Игорь Александрович, к. ф.-м. н.*

*[pvm@optics.imp.uran.ru](mailto:pvm@optics.imp.uran.ru)*

Изучение магнитных свойств твердых тел является важной и интересной физической задачей. Для теоретического описания макроскопических свойств твердых тел в настоящее время применяется множество подходов, в том числе описание таких свойств через микроскопические модели с учетом электронной структуры. Примером такого рода макроскопических эффектов является магнетизм коллективизированных (итинерантных) электронов. Одной из наиболее простых теорий, используемой для описания магнитных свойств итинерантных магнетиков является теория Стонера.

Теория Стонера получается в рамках приближения среднего поля для модели Хаббарда, в которой к энергии свободных электронов добавляются, взаимодействие электронов с внешним магнитным полем и электрон-электронное взаимодействие. Теория Стонера описывает спиновую восприимчивость парамагнитной фазы, которая в отличие от восприимчивости Паули частично учитывает электрон-электронные взаимодействия. Вследствие чего восприимчивость имеет точку расходимости для определенной величины электрон-электронного взаимодействия и плотности состояний на уровне Ферми. Данная точка дает критерий Стонера возникновения ферромагнетизма.

Критерий Стонера определяет только условия возникновения ферромагнитной фазы, но получить из него информацию о свойствах самой ферромагнитной фазы нельзя. Однако, если задать конкретный вид затравочной плотности состояний и численно решить систему основных уравнений теории Стонера, то представляется возможным вычислить температуру перехода из ферромагнитной фазы в парамагнитную (температуру Кюри  $T_C$ ).

В данной работе было сделано сравнение температуры Кюри  $T_C$ , полученной по приближенной аналитической формуле с данными прямого численного расчета. Сравнение проведено для различных форм плотности состояний (прямоугольной, треугольной, гауссиана, лоренциана и полукруга).

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 03-02-39024, а также программе фонда содействия отечественной науке для поддержки молодых кандидатов наук РАН 2005г. и программы фонда «Династия» совместно с Международным Центром Фундаментальной физики в Москве для молодых кандидатов наук 2005 г.

## **Теоретическое и экспериментальное исследование оптической проводимости интерметаллидов $\text{Pr}_2\text{Fe}_{17}$ и $\text{Gd}_2\text{Fe}_{17}$**

**Манохин Пётр Владимирович**

*Анисимов Владимир Ильич*

*Лукоянов Алексей Владимирович, Кузьмин Юрий Иванович, Князев Юрий Валентинович, Кучин Анатолий Григорьевич,*

*Уральский Государственный Технический Университет (УПИ)*

*Некрасов Игорь Александрович, к. ф.-м. н.*

*[pvm@optics.imp.uran.ru](mailto:pvm@optics.imp.uran.ru)*

Редкоземельные ферромагнитные интерметаллиды  $\text{R}_2\text{Fe}_{17}$  (R – редкоземельный металл) хорошо известны благодаря низкой температуре Кюри и сильной одноосевой магнитной анизотропии. В этих соединениях была обнаружена необычная тенденция резкого повышения температуры магнитного упорядочения с ростом концентрации малых примесей немагнитных элементов, что делает материалы такого типа перспективными для создания постоянных магнитов.

В данной работе проведено экспериментальное и теоретическое исследование оптических свойств соединений  $\text{Pr}_2\text{Fe}_{17}$  и  $\text{Gd}_2\text{Fe}_{17}$ . Экспериментально методом эллипсометрии в диапазоне длин волн 0,22-15 мкм получены оптические константы и параметры носителей заряда (плазменные и релаксационные частоты). По результатам оптических измерений показателя преломления  $n$  и коэффициента поглощения  $k$ , получены  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  – мнимая и действительная часть комплексной диэлектрической проницаемости и  $R$  – коэффициент отражения. Анализ энергетической зависимости  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  в рассматриваемом спектральном диапазоне в соответствии с межзонным механизмом возбуждения электронов позволил определить плазменную частоту  $\Omega$  и эффективную частоту релаксации  $\gamma$  свободных носителей заряда.

Выполнен самосогласованный спин-поляризованный расчет электронной структуры с использованием приближения локальной электронной спиновой плотности. Рассчитаны полная и парциальные плотности

состояний железа. Их формы для данных соединений довольно схожи между собой, а также качественно напоминают форму плотности состояний ферромагнитного железа.

По экспериментальным данным была построена дисперсионная зависимость оптической проводимости, которая для обеих систем приведена на (рис. 1). Для интерпретации дисперсии межзонного вклада в оптическую проводимость на базе зонного расчета выполнена свертка парциальных плотностей состояний на каждом неэквивалентном ионе элементарной ячейки с учетом правил отбора по квантовым числам. Зависимости полученных свертки также приведены на (рис. 1). Сравнение показывает, что суперпозиция всех свертки довольно хорошо воспроизводит экспериментальную форму дисперсионной зависимости оптической проводимости. Резкие максимумы данной зависимости могут быть объяснены межзональными переходами электронов с разными проекциями спина. Вычисления отражают также, что для обоих соединений принципиальный вклад в оптическую проводимость вносят  $d$ -электроны с проекцией спина вниз ( $\downarrow$ ).

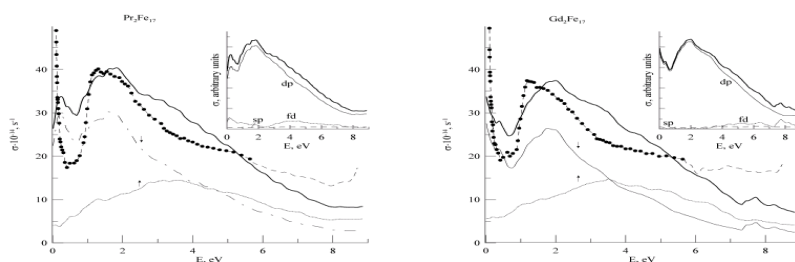


рис. 1 Экспериментально полученные (точки) и теоретически рассчитанные (сплошная жирная линия) оптические проводимости для интерметаллидов  $Pr_2Fe_{17}$  (слева) и  $Gd_2Fe_{17}$  (справа). Теоретически рассчитанный вклад в оптическую проводимость от состояний с проекцией спина  $\downarrow$  (точка-пунктир) и с проекцией спина  $\uparrow$  - сплошная линия. На вставках показаны теоретически рассчитанные вклады от переходов между состояниями с различным главным квантовым числом.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 03-02-39024, а также Фонда содействия отечественной науке по программе поддержки молодых кандидатов наук РАН 2005г. и программы фонда «Династия» совместно с Международным Центром Фундаментальной физики в Москве для молодых кандидатов наук 2005 г.

## МДП структура с полиамидным диэлектриком в условиях сорбции паров воды

**Мезавцов Владимир Евгеньевич**

Воронежский Государственный Университет

Тутов Евгений Анатольевич к.ф.-м.н.

[mve@box.vsi.ru](mailto:mve@box.vsi.ru)

Целью данной работы являлось изучение возможности применения ароматических полиамидов в качестве чувствительного слоя в сенсорах влажности емкостного типа на основе МДП структур, а также анализ возможностей таких структур как инструмента исследования сорбционных и диффузионных свойств полиамидов электрофизическими методами.

Сформирована и изучена в качестве сенсора влажности емкостного типа кремниевая МДП структура с подзатворным слоем из сульфатсодержащего ароматического полиамида. Отличительной особенностью сенсора на основе данного материала является его высокая чувствительность в области больших значений относительной влажности при достаточно хорошем быстродействии. Измерение электрической емкости структуры на различных частотах дает принципиальную возможность выяснения характера распределения воды в матрице полимера. Зависимость высокочастотной (1 МГц) емкости структуры от относительной влажности, т.е. градуировочная кривая сенсора, типична для изотерм сорбции паров воды подобными полимерами.

Исследуемая структура помещалась в герметичную измерительную ячейку, для удаления паров воды из которой использовали силикагель марки ШСМ. Парциальное давление паров воды при этом считалось соответствующим условному значению нулевой относительной влажности ( $p/p_0 = 0\%$ ). При исследовании кинетических характеристик сенсора структура быстро перемещалась из ячейки с  $p/p_0 = 0\%$  в ячейку с  $p/p_0 = 100\%$  и обратно. Все измерения проводились при температуре 295 К.



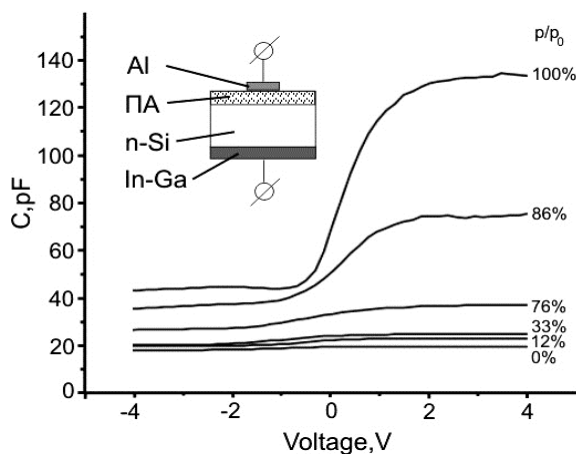
Измерения на низких частотах (1 kHz) показали, что сорбция паров воды в ПА сопровождается значительным (в 1000 раз) возрастанием электрической емкости за время порядка часа. Такое существенное изменение емкости не может быть объяснено только аддитивным вкладом сорбированной полимером воды. Свой вклад, имеющий структурную природу, вносит приэлектродная емкость двойного заряженного слоя на электродных границах ПА/металл и ПА/Si (слой Гельмгольца), по отношению к которым ПА с водой является электролитом, а также эффект Максвелла-Вагнера, т.е. межслойная поляризация, заключающаяся в накоплении заряда на границах слоев с разной электропроводностью при протекании тока перпендикулярно слоям. В данном случае это внутренние гетерограницы полимерная матрица/сорбтив.

Дисперсия диэлектрических потерь в гидратированных ПА пленках имеет вид, типичный для полимеров данного типа. Характер кривой, являющейся огибающей для релаксаторов широкого спектра частот и объясняемой обычно эффектом Максвелла-Вагнера, указывает на то, что с ростом частоты переменного электрического поля до 1 МГц вклад структурных эффектов уменьшается и перестает определять величину емкостного отклика сенсора влажности.

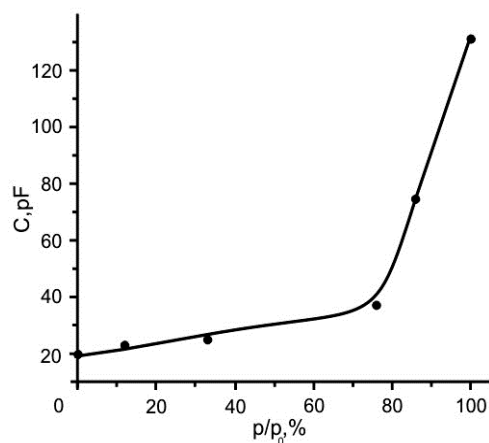
Измерения электрической емкости конденсаторных структур с ПА диэлектриком в условиях сорбции паров воды на частотах ниже 1 МГц характеризуются большой величиной эффекта, однако требуют значительного времени, сопоставимого со временем установления сорбционного равновесия по гравиметрическим данным. При этом вклад в изменение емкости композита полимерная матрица/сорбтив имеет аддитивную и структурную составляющие, но их разделение представляется весьма проблематичным.

С целью минимизации роли “медленных” эффектов в дальнейшем исследовании использована методика ВЧ ВФХ, ранее применявшаяся нами для решения аналогичной задачи изучения сорбции паров воды в пористом кремнии. Отметим, что более простая по сравнению с полимерами морфология пористого кремния позволила сравнительно легко получить количественные оценки.

ВЧ ВФХ структуры Si/ПА/металл в условиях вариации относительной влажности, представленные на *рис. 1*, типичны для МДП структур с невысокой плотностью поверхностных состояний и отсутствием значительного встроенного заряда в диэлектрике. Емкость структуры при положительных смещениях определяется диэлектрической проницаемостью слоя полимера, и ее рост с увеличением парциального давления паров воды отражает возрастание содержания воды в пленке ПА. Зависимость этой емкости от относительной влажности, т.е. градуировочная кривая сенсора, приведена на *рис. 2*. Ее вид качественно отражает ход изотермы сорбции паров воды полимерами данного типа (изотерма Генри), для которого характерен резкий рост при увеличении относительной влажности свыше 80 %.



*рис. 1*



*рис. 2*

Сорбция/десорбция паров воды полимером не связана с изменением его зарядового состояния, что отражает характер изменений ВФХ исследованной структуры. В водных электролитах реакции ионного обмена (основная область применения данного материала) сопровождаются изменением заряда в пленке полиамида и должны приводить к характерному сдвигу ВФХ по оси напряжений. Наши предварительные эксперименты подтверждают перспективность рассмотренной МДП структуры как рNa-чувствительного химического сенсора, работающего без электрода сравнения.

Использование полимерной пленки не только в качестве рецептора молекул сорбата, но и в качестве трансдюсера, возможность частотного разделения сигналов от сорбата разной степени ассоциированности, легкость управления содержанием “наполнителя” в полимерной матрице делают структуру Si/ПА/металл интересной не только в качестве сенсора, но и как инструмента исследования сорбционных и диффузионных свойств полимерных материалов.

## Электронная структура сильно коррелированных систем

*Некрасов Игорь Александрович*

*Институт физики металлов УрО РАН*

*Анисимов Владимир Ильич, д.ф.-м.н.*

*[nekrasov@optics.imp.uran.ru](mailto: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].

В упомянутой выше расчетной схеме LDA+DMFT используется атомоподобный базисный набор орбиталей. Если взаимодействующие электроны хорошо локализованы, как, например  $4f$ -состояния редкоземельных ионов, то атомные орбитали являются хорошим базисом. Однако в задачах, связанных с переходом металл-изолятор, рассматриваемые коррелированные состояния становятся частично проводящими и пространственно протяженными. Ошибка, появляющаяся при использовании атомных орбиталей, наиболее велика в случае материалов с сильными ковалентными эффектами. Так в оксидах переходных металлов валентные зоны формируются смешиванием  $3d$ -орбитали металла и  $2p$ -орбитали кислорода.

Таким образом, для явного описания корреляционных эффектов необходимо из первых принципов построить малый орбитальный базис, содержащий только физически значимые орбитали. При этом важными требованиями для выбора такого малого базиса является 1) воспроизведение выбранных зон в полном орбитальном базисе, 2) вычисление параметров модельного гамильтониана в малом базисе и 3) переход в полный орбитальный базис. Все указанные требования удовлетворяются для формализма функций Ванье, предложенного и развитого в работе [2].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 03-02-39024, а также Фонда содействия отечественной науке по программе поддержки кандидатов наук РАН 2005 г. (ИН) и программы фонда «Династия» совместно с Международным Центром Фундаментальной физики в Москве для молодых кандидатов наук 2005 г (ИН).

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](http://psi-k.dl.ac.uk/newsletters/News_56/Highlight_56.pdf)).

[2] V.I. Anisimov, D.E. Kondakov, A.V. Kozhevnikov, I.A. Nekrasov, Z.V. Pchelkina, J.W. Allen, S.-K. Mo, H.-D. Kim, P. Metcalf, S. Suga, A. Sekiyama, G. Keller, I. Leonov, X. Ren, D. Vollhardt, *cond-mat/0407359* (2004).

## Исследование усталостных свойств ионно-имплантированного сплава титана ОТ4

*Новоселов Андрей Андреевич*

*Замараев Егор Борисович*

*Удмуртский Государственный Университет*

*Баянкин Владимир Яковлевич, д.т.н.*

*[novhome@ugl.ru](mailto:novhome@ugl.ru)*

Исследовано влияние дозы имплантации ионов инертного газа и химически активного элемента на усталостную прочность и развитие усталостной трещины при разрушении титанового сплава ОТ4.

Образцы представляют собой пластины длиной 55 мм и сечением 9Ч2 мм<sup>2</sup>, вырезанные из листа в состоянии поставки, электроискровой резкой. Состав образцов в исходном состоянии (масс.%): Al–2,2, Mn–0,6,

Si–0,06, Fe–0,06, остальное Ti. Образцы предварительно полировались. После этого часть образцов подверглась облучению ионами Si<sup>+</sup>, а другая часть ионами Ag<sup>+</sup> (энергия ионов 40 кэВ, плотность тока 10 мкА/см<sup>2</sup>) до интегральной дозы 10<sup>15</sup>–5·10<sup>16</sup> ион/см<sup>2</sup>, на ионно-лучевой установке типа ИЛУ–2 в вакууме не хуже 10<sup>–3</sup> Па.

Микротвердость поверхностных слоев измерялась при нагрузке на индентор 20 и 100 г. Деформирование образцов осуществлялось на стенде для испытания на усталостную прочность до разрушения. Максимальное знакопеременное изгибающее напряжение по сечению образца равнялось 24–45 кгс/мм<sup>2</sup> при частоте 22,5 Гц.

Значение микротвердости по длине исходных образцов лежит в пределах от 220 до 230 кгс/мм<sup>2</sup>. В результате измерений обнаружено, что микротвердость при облучении образцов ионами Si<sup>+</sup> и Ag<sup>+</sup> увеличилась на 10–30% по сравнению с исходными значениями. Максимальное увеличение микротвердости происходит при дозе облучения 10<sup>16</sup> ион/см<sup>2</sup>, как кремнием, так и аргоном.

Испытания на усталостную прочность показали, что образцы, облученные ионами Si<sup>+</sup> и Ag<sup>+</sup>, выдержали большее количество циклов до разрушения по сравнению с исходными образцами при равных напряжениях по сечению образцов. Максимальное увеличение усталостной прочности происходит при дозе 10<sup>16</sup> ион/см<sup>2</sup>, так же как и увеличение микротвердости. Предположительно, происходит это из-за образования радиационных дефектов, особенно при облучении тяжелыми ионами аргона, вследствие чего возникает энергетический барьер, закрепляющий подвижные дислокации. Для случая, когда облучают ионами кремния, возможно, происходит упрочнение за счет образования соединения кремния с титаном.

Исследования фрактографии поверхностей излома проводились для необлученных образцов и образцов, облученных до интегральной дозы 10<sup>16</sup> ион/см<sup>2</sup>, обеспечивающей максимальное увеличение усталостной прочности. В ходе исследования поверхностей излома облученных образцов выявлено наличие волокнистой структуры на краю поверхности излома, находящегося с облученной стороны. Заметных различий топографии изломов образцов, облученных Ag<sup>+</sup> или Si<sup>+</sup>, не выявлено. Из анализа полученных изображений следует, у образцов, облученных ионами Ag<sup>+</sup> и Si<sup>+</sup>, разрушение начинается с необлученной стороны, что коррелирует с результатами работ других авторов.

## **Моделирование структуры фуллереновых конденсатов C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>, C<sub>60</sub>-C<sub>70</sub>**

*Пасюкова Юлия Александровна*

*Челябинский Государственный Университет*

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

*[pitja@74.ru](mailto:pitja@74.ru)*

Фуллеритами называют твердое состояние связанных молекул фуллерена. Фуллериты являются типичными молекулярными кристаллами, в которых связи между фуллеренами осуществляются ван-дер-ваальсовскими взаимодействиями. Наиболее изученными теоретически и экспериментально являются конденсаты C<sub>60</sub>, в то время как структура конденсатов состоящих из других фуллеренов или смеси разных фуллеренов остается не достаточно изученной. Представление о структуре таких фуллеритов может дать компьютерное моделирование. Для этого необходима разработка и апробация методики моделирования структуры фуллереновых конденсатов, что и составило цель данной работы.

В качестве модели для расчетов было принято, что кристаллы фуллерита состоят из молекул фуллеренов C<sub>60</sub>, смеси молекул C<sub>60</sub> и C<sub>70</sub> или молекул C<sub>70</sub>. Взаимодействие молекул фуллеренов в конденсированной системе осуществляется за счет ван-дер-ваальсовых взаимодействий.

На первом этапе рассчитывались парные фуллерен-фуллереновые потенциалы взаимодействия C<sub>60</sub>-C<sub>60</sub>, C<sub>70</sub>-C<sub>70</sub> и C<sub>60</sub>-C<sub>70</sub>. Расчет парной энергии связей E<sub>i-f</sub> выполняли методом атом-атомного потенциала путем вычисления энергии связей всех атомов одного фуллерена со всеми атомами другого. Энергия связей фуллеренов зависит от расстояния между их центрами d и от относительных разворотов, задаваемых углами φ и θ (см. рис.1.). Вычислялись удельные энергии связей, приходящиеся на один атом углерода в молекуле фуллерена.

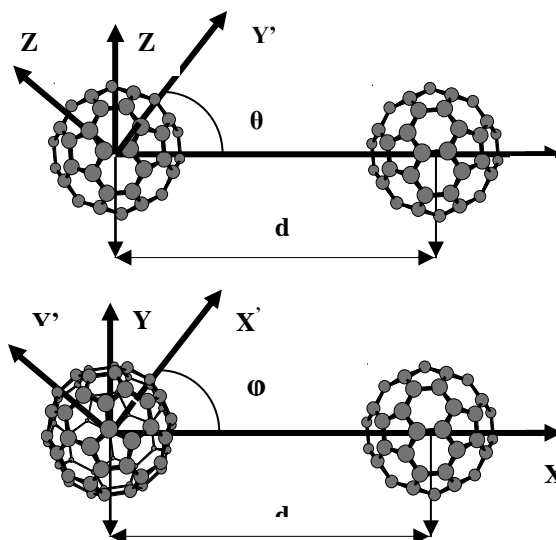


рис.1.

Первоначально были найдены расстояния  $d_{\min 0}$  (при  $\varphi=0$  и  $\theta=0$ ), на которых энергия взаимодействия минимальна. Затем энергия взаимодействия вычислялась при различных относительных поворотах фуллеренов. По полученным данным строились энергетические картины (см. рис.2). На рис. 2а приведен пример энергетической картины для парного взаимодействия  $C_{60}-C_{60}$ . На графике видно четыре энергетических минимума, соответствующих углам разворота, при которых энергия парного взаимодействия минимальна. Минимум энергии наблюдается на углах  $\varphi$  и  $\theta$  равных  $(65^\circ; 150^\circ)$ ,  $(65^\circ; 330^\circ)$ ,  $(250^\circ; 30^\circ)$ ,  $(250^\circ; 210^\circ)$  и имеет значение  $-432$  Дж/моль.

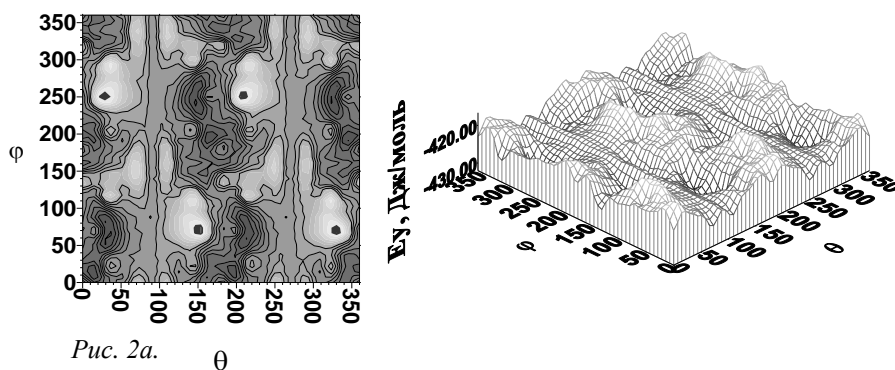


Рис. 2а.

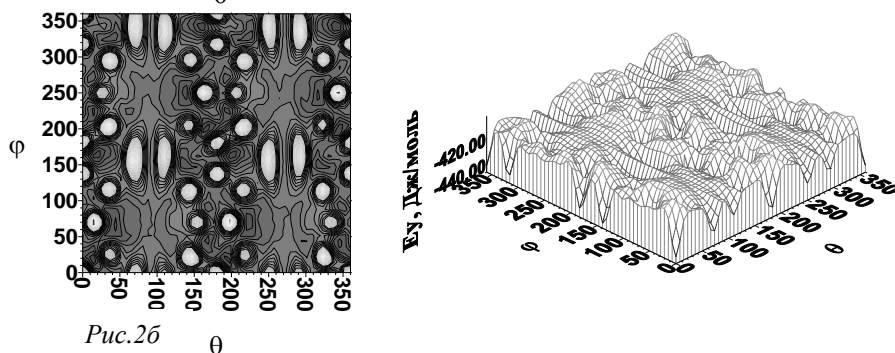


Рис.2б

Максимальное значение, которое может принимать энергия парного взаимодействия равно  $-417$  Дж/моль. Разница между минимальным и максимальным значением энергии парного взаимодействия  $C_{60}-C_{60}$   $25$  Дж/моль, что составляет примерно  $2\%$  от среднего значения энергии связей. Поэтому при расчете структуры фуллерита, состоящего только из молекул  $C_{60}$ , можно пренебречь вкладом относительных углов разворота в величину энергии связей. На основании этих расчетов были получены новые потенциалы, которые описывают взаимодействие между молекулами фуллеренов как целыми без учета атом-атомных взаимодействий. Причем константы, входящие в эти потенциалы, были вычислены в результате расчета парных взаимодействий молекул по усредненным значениям энергии связей и межмолекулярного расстояния.

Для фуллеритов  $C_{70}$ - $C_{70}$  и  $C_{60}$ - $C_{70}$  (см. рис. 2б.) абсолютное изменение значения энергии связей составляет уже 12% от среднего значения. Энергия связей таких структур будет существенно зависеть от относительных углов разворота молекул. Поэтому константы, входящие в потенциал, описывающий взаимодействие между молекулами фуллеренов как целыми, вычислялись в зависимости от относительных углов разворота фуллеренов. В результате были найдены потенциалы парных взаимодействий фуллеренов.

На втором этапе расчетов находили трехмерную структуру фуллереновых конденсатов  $C_{60}$ . Находили удельные энергии связей кристаллов с различными элементарными ячейками. Структуры с периодическим расположением молекул задавались путем трансляции элементарной ячейки. Были рассмотрены элементарная кубическая, кубическая гранецентрированная, кубическая объемноцентрированная и гексагональная элементарные ячейки. В результате расчетов были найдены трехмерные структуры фуллеритов, для которых энергия связей минимальна. Параметры структуры по результатам моделирования  $C_{60}$  и  $C_{70}$  соответствуют экспериментально наблюдаемым и найденным в результате расчетов в других исследованиях.

## Статистическое исследование квазикристаллических симметрий в древесно - графовом представлении

*Полянский Дмитрий Александрович*

*Дальневосточный Государственный Университет*

*Юдин Виталий Витальевич*

*[rambo192@mail.ru](mailto:rambo192@mail.ru)*

В данной работе представлена методика статистического подхода к анализу моделей квазикристаллических симметрий на примере их минимального представителя, мозаики Пенроуза (рис.1). Данную мозаику можно рассматривать как систему вершинных координат, ранг которых (число исходящих рёбер) колеблется от 3 до 7. Была найдена статистика распределения данных координат (рис.2), которая представляет собой наложение средней ниспадающей тенденции, подчиняющейся гиперболическому закону  $1/r^\gamma$  с показателем  $\gamma \sim 1,5$  и всплеска на координате №5, соответствующей общей пентасимметрии мозаики. С другой стороны, мозаика Пенроуза состоит из двух типов ромбов, между которыми возможны два типа контактов (рёберный и точечный), что в совокупности образует квартетный алфавит  $[2q \times 2p]$  [1]. Адекватным отображением, в котором в явном виде представлены обе компоненты, являются древесные графы Кейли (ДК). Ячейки мозаики отображаются вершинами графа, отношения смежности – рёбрами графа. Построение дерева идёт следующим образом: за центр принимается одна из ячеек, вокруг строится первая координационная сфера из всех контактирующих с ней ячеек. Вторая сфера строится из всех ячеек, контактирующих с ячейками первой и т.д [2].

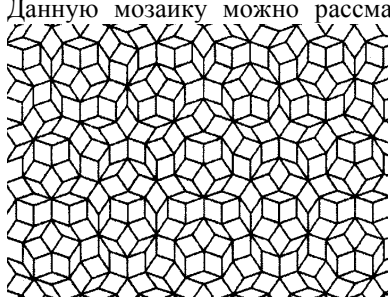


рис.1. Мозаика Пенроуза

Полученный древесный граф является сложной системой, симплициальным комплексом, и для его изучения необходимо привлекать соответствующие методы декомпозиции. Разложение на кусты по степеням ветвистости, применявшееся нами ранее [2] не позволяет различать типы вершин и контактов, т.е. оставляет без внимания структуру квартетного алфавита  $[2q \times 2p]$ . Поэтому была разработана методика протодекомпозиции, в качестве элемента которой берётся один из ромбов с соответствующим типом контакта (рёберным или точечным) [1]. Эта конструкция в данном случае является аналогом буквы алфавита. Таких элементов в мозаике Пенроуза четыре. Вероятностное распределение данных элементов также оказалось гиперболическим с показателем  $\gamma \sim 1$ , что соответствует так называемой ЦПМ – статистике [1], которой подчиняется в частности распределение слов в реальных языках. То есть даже в унарном приближении ДКП содержит признаки языковой системы. При такой декомпозиции можно построить соответствующие перечисляющие структуры, перевести их в вероятностную форму и задать энтропийные функционалы и рассматривать их перколяцию (протекание) по уровням ДК. Перколяция энтропийного функционала в форме Вайда [1] в для по уровням данного ДК оказалась периодической относительно среднего инварианта  $\sim 0.68$ .

Следующим шагом будет переход к бинарному, бислоговому рассмотрению, в качестве элемента которого берётся радиальная связка из двух элементов унарного алфавита, так называемый бислог. На данном уровне рассмотрения алфавит представляет прямое произведение двух унарных алфавитных пространств  $[2q \times 2p] \otimes [2q \times 2p]$  и состоит соответственно из 16 символов. Первым шагом является построение исходных матриц перехода одного унарного элемента в другой в абсолютных значениях. В дальнейшем уже необходимо учитывать логику разложения, которая может быть условной или совместной. В случае условной логики производится асимметричное разбиение перечисляющей структуры на вектор состояния и матрицу перехода, получаемую в результате строчной нормировки исходной матрицы. Среднее распределение элементов вектора состояния подчиняется ЦПМ – статистике, перколяция его компонент по иерархиям ДК периодична относительно определённых инвариантных значений, распределение строк усреднённой матрицы перехода по

энтропии так же подчиняется ЦПМ, перколяция энтропии данных матриц также периодически относительно среднего инварианта, равного 0.618. Т.е. обе перечисляющие подструктуры в случае условной логики несут в себе признаки языковой системы. В случае совместной логики производится полная нормировка исходной матрицы, и полученную в результате структуру можно представить как шестнадцатимерный вектор. Данное представление даёт возможность произвести ранжировку и определить тип распределения элементов бислогового алфавита. Оно так же подчиняется ЦПМ – статистике. Перколяция энтропии по уровням ДК в данном представлении также периодически относительно среднего значения 0.872.

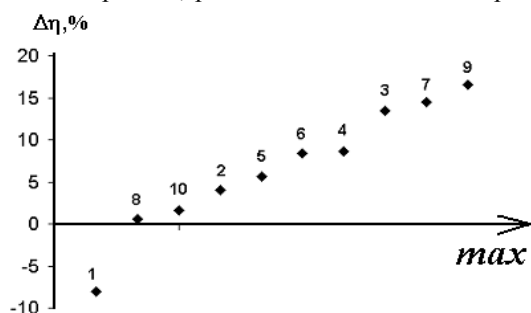


рис. 2. Изменение структурированности стримеров при бислоговой агрегации.

Для реальных языков установлен факт понижения энтропии при переходе на алфавиты более высоких уровней понижается энтропия слова, а, следовательно,

растет его семантический потенциал. Нами была проведена проверка подобной тенденции для ДК, отображающего мозаику Пенроуза. В качестве слов на ДК выбирались стримеры [2], для исследования случайным образом были отобраны десять штук. Для каждого стримера была найдена энтропия и соответствующий показатель структурированности  $\eta$  [1] в унарном и бинарном представлении и их разница. На рис. 2 приведена разница  $\eta$ -показателей в ранжированной шкале, положительный знак которой указывает на то, что уже бислоговая агрегация на алфавите приводит к повышению структурированности, смысловитости. Только стример № 1, при агрегации понизил  $\eta$ -показатель, что указывает на большую стохастизацию при агрегации. Статистический анализ данного стримера показал, что он обладал весьма высокой структурированностью до агрегации. Остальные стримеры при бислоговой агрегации повысили свою структурированность.

Полученные результаты дают основания считать мозаику Пенроуза в древесно-графвом представлении планарной языковой системой.

Список публикаций:

- [1]. Юдин В.В. и др. // Кристаллография. 2002. Т. 47. № 2. С. 224.
- [2]. Юдин В.В., и др. // Изв. РАН. Сер. физическая. 2001. № 10. С. 1405.

## Моделирование кривых термолюминесценции с использованием различных соотношений между микропараметрами центров захвата и рекомбинации

*Попко Евгений Александрович*

*Уральский Государственный Технический Университет (УПИ)*

*Вайнштейн Илья Александрович, к.ф.-м.н.*

*[Dtdk@mail.ru](mailto:Dtdk@mail.ru)*

Численное моделирование процессов термолюминесценции (ТЛ) в диэлектриках на основе решения систем кинетических уравнений позволяет получать информацию о параметрах образца, связанных с микроскопическими свойствами дефектов и ловушек носителей заряда. Более того, появляется возможность прогнозировать характер зависимостей, которые невозможно получить в экспериментальных условиях.

Цель данной работы - проанализировать зависимости параметров ТЛ-пиков, определяемых из эксперимента, при возможных различных соотношениях между микропараметрами центров захвата и рекомбинации.

В качестве объекта исследования использовали дозиметрические кристаллы кислород-дефицитного корунда, которые находят широкое применение, как термолюминесцентные детекторы ионизирующего излучения. Была выбрана модель «одна ловушка – один рекомбинационный центр». Соответствующая ей система дифференциальных уравнений решалась методом Рунге-Кутты-Мерсона с автоподбором шага. Был выполнен учет температурного тушения. Основные входные параметры модели : скорость нагрева  $\beta$ , термическая глубина ловушки  $E_n$ , скорости захвата на ловушку  $A_n$  и скорость рекомбинации  $A_h$ , начальные концентрации заполненных ловушек  $n_0$ , общая концентрация ловушек  $N$ , энергия активации тушения  $E_q$  и частотные факторы учитываемых термоактивационных процессов  $s_n$  и  $s_q$ .

Основными параметрами ТЛ-пика являются температура максимума интенсивности ( $T_m$ ), полуширина пика ( $\omega$ ) и высвеченная светосумма ( $S$ ). В качестве параметров, от которых строились зависимости, были взяты соотношения  $A_n / A_h$  и  $n_0 / N$ . Для расчета использовались параметры, полученные в результате аппроксимации основного дозиметрического пика в анион-дефектном корунде [1]:  $E_n = 1.21 \text{ eV}$ ,  $E_q = 1.18 \text{ eV}$ ,  $s_n = 1.25 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$ ,  $s_q = 10^{13} \text{ s}^{-1}$ ,  $\beta = 1 \text{ K/s}$ ,  $A_n = 1 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $A_h = 4 \cdot 10^{-8} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $n_0 / N = 0.02$ .

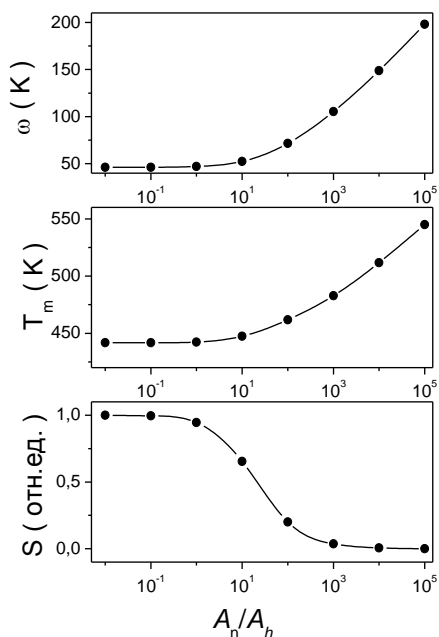


Рисунок. Зависимости параметров пика от отношения скорости захвата на ловушку к скорости рекомбинации

На рисунке приведены зависимости параметров пика от величины соотношения  $A_n/A_h$  для скорости нагрева 1 K/s. Видно, что температура максимума и полуширина начинают возрастать при  $A_n/A_h > 10$ . В свою очередь для светосуммы  $S$  основной участок падения приходится на интервал  $A_n/A_h = 1 \div 100$ . Зависимости для соотношения  $n_0/N$  характеризуются тем, что при  $A_n/A_h > 0,1$  температура максимума и полуширина падают, а светосумма растет.

Таким образом, соответствие результатов моделирования экспериментальным данным достигается при  $A_n/A_h < 10$ . При этом значения параметров ТЛ-пика остаются практически неизменными при  $A_n/A_h < 0,1$ . Чтобы установить оптимальные значения  $A_n/A_h$  использования данной модели недостаточно, необходимо дополнительное исследование процессов разгорания и затухания. Результаты расчетов согласуются с представлениями о данной модели и позволяют развивать ее в соответствии с экспериментальными зависимостями.

Список публикаций:

[1]. Попко Е.А., Орозбек уулу Аскар, Вайнштейн И.А., Кортков В.С. Учет температурного тушения при моделировании параметров ТЛ-пиков в  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  // Вестник УГТУ-УПИ, 2004, спец.выпуск, сс. 145 - 147.

## Оценка состояния материала путем комплексного анализа неупругих эффектов в спектре внутреннего трения

**Пуханова Ирина Викторовна**

**А. Н. Чуканов**

*Тулский Государственный Университет*

*[pukhanova@rambler.ru](mailto:pukhanova@rambler.ru)*

Проведен анализ механизмов основных процессов, формирующих неупругие эффекты в температурном спектре внутреннего трения, связанных с деградацией и деструкцией металлических сплавов при различных внешних воздействиях.

Под деградацией структуры понимали изменение концентрации примесей внедрения (углерода, азота) в основном твердом растворе, приводящем к эффекту Сноэка; образование дислокационных атмосфер, сегрегаций и выделений, изменение подвижности дислокаций – приводящих к эффекту Сноэка – Кэ – Кестера; зернограничное скольжение.

Под деструкцией понимали зарождение и развитие макро- и микронесплошностей (трещин), формирующее неупругий эффект в зонах локализации внутренних напряжений у дефектов поврежденности [1,2].

Предложено проводить комплексный анализ параметров перечисленных неупругих эффектов для увеличения информативности описания происходящих микро- и макроструктурных изменений.

Анализируется информация, полученная при низкочастотных (обратный крутильный маятник,  $f \sim 1\text{c}^{-1}$ ) измерениях амплитудных и температурных зависимостей внутреннего трения, образцов малоуглеродистых сталей, идентифицируются механизмы фиксируемых в виде неупругих эффектов: эффект Сноэка; Кестера; зернограничного трения, определяются их количественные параметры.

Описанный подход дает возможность более качественно описывать состояние материала. В частности, для деформированных образцов – фиксировать переход из области пластического в область пластико-деструкционного состояния. Получены аналитические выражения, описывающие суммарный релаксационный спектр изученных сплавов.

Список публикаций:

[1]. Левин Д.М., Чуканов А.Н., Муравлева Л.В. Внутреннее трение как мера локальной поврежденности металлических материалов//Известия РАН. Серия Физическая. - 2000.- Т.64 - № 9.- С. 1714 - 1717.

[2]. Левин Д.М., Чуканов А.Н. Неупругие эффекты как инструмент изучения зарождения и развития поврежденности//Известия ТулГУ. Серия: Физика. -2003.-вып.3.-С.17-46.

## Изучение спектральных свойств $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$ в рамках LDA+DMFT подхода

*Пчелкина Злата Викторовна*

*Некрасов Игорь Александрович, Мыльникова Анастасия Сергеевна,*

*Анисимов Владимир Ильич, Дитер Фольхардт*

*Институт физики металлов УрО РАН*

*Коротин Михаил Аркадьевич, д.ф.-м.н.*

*[pzv@optics.imp.uran.ru](mailto:pzv@optics.imp.uran.ru)*

Соединение  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  является единственным известным на сегодняшний день бескупратным сверхпроводником со структурой слоистого перовскита ( $\text{Тс} \sim 1\text{К}$ ), причем для перехода в сверхпроводящее состояние не требуется допирования. Будучи изоструктурным известному высокотемпературному сверхпроводнику  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  ( $\text{Тс}$  порядка  $50\text{К}$  при замещении  $15\%$   $\text{La}$  на  $\text{Sr}$ ), который является антиферромагнитным диэлектриком,  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  является парамагнитным металлом с сильными электронными корреляциями ( $U$ -величина кулоновского взаимодействия электронов на узле порядка  $W$  - ширины  $\text{Ru-4d}$  зоны).

Экспериментальные исследования поверхности Ферми с помощью эффекта де Гааза-ван Альфена и фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) качественно подтвердили вид рассчитанной в рамках зонной теории поверхности Ферми. Однако ARPES, в отличие от метода де Гааза-ван Альфена, позволяет получить энергетическую дисперсию электронов (зоны), причем экспериментальные ширины зон значительно меньшие, чем в зонных расчетах. Это свидетельствует о наличии сильных электронных корреляций. Поэтому представляет интерес теоретическое моделирование спектральных свойств  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  с использованием расчетной схемы LDA+DMFT [1], объединяющей стандартный зонный подход в рамках приближения локальной электронной плотности (LDA) и теорию динамического среднего поля (DMFT) для явного учета электронных корреляций в  $\text{Ru-4d}$  зоне. Влияние корреляционных эффектов в  $\text{Ru-4d}$  зоне на другие валентные состояния (например,  $\text{O-2p}$ ,  $\text{Sr-5d}$  и т.д.) было учтено в рамках недавно предложенного формализма функций Ванье [2].

Использование LDA+DMFT расчета в сочетании с формализмом функций Ванье позволило описать спектральные свойства  $\text{Sr}_2\text{RuO}_4$  в широком интервале энергий вокруг уровня Ферми для всех валентных оболочек. Рассчитаны плотности состояний валентной зоны и зоны проводимости. Получено качественное согласие с известными спектральными экспериментальными данными. Рассчитанные значения эффективной массы электронов ( $m^*/m \sim 3$ ) хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными методом де Гааза-ван Альфена и в измерениях удельной теплоемкости. Ширины зон в LDA+DMFT расчетах уменьшились за счет корреляционных эффектов на величину  $m^*/m$ , что согласуется с экспериментальными ARPES данными.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 03-02-39024, а также Фонда содействия отечественной науке по программе поддержки аспирантов РАН 2005 г. (ЗП) и кандидатов наук РАН 2005 г. (ИН) и программы фонда «Династия» совместно с Международным Центром Фундаментальной физики в Москве для молодых кандидатов наук 2005 г (ИН).

Список публикаций:

[1] K. Held, I.A. Nekrasov, G. Keller, V. Eyert, N. Blumer, A.K. McMahan, R.T. Scalettar, Th. Pruschke, V.I. Anisimov, and D. Vollhardt, *Psi-k Newsletter* **56**, 65 (2003), [[psi-k.dl.ac.uk/newsletters/News\\_56/Highlight\\_56.pdf](http://psi-k.dl.ac.uk/newsletters/News_56/Highlight_56.pdf)].

[2] V.I. Anisimov, D.E. Kondakov, A.V. Kozhevnikov, I.A. Nekrasov, Z.V. Pchelkina, J.W. Allen, S.-K. Mo, H.-D. Kim, P. Metcalfe, S. Suga, A. Sekiyama, G. Keller, I. Leonov, X. Ren, D. Vollhardt, *cond-mat/0407359* (2004).

## Исследование кислородной подрешетки кристалла $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ методом каналирования

*Рахимов Степан Вадимович*

*Ростовский Государственный Университет*

*Мальшевский Вячеслав Сергеевич, д.ф.-м.н.*

*[strakh@fromru.com](mailto:strakh@fromru.com)*

На основе диффузионной модели каналирования ионов в многокомпонентных кристаллах исследованы особенности кислородной подрешетки в кристалле  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ . На измеренной угловой зависимости выхода резонансного упругого рассеяния  $^{16}\text{O}$  ( $^{16}\text{O}$  ионов гелия на ядрах кислорода при энергии ионов  $3.055\text{ МэВ}$  вдоль направления  $\langle 001 \rangle$  наблюдались ступеньки при угле влета  $\approx 0.4^\circ$ . Из сравнения измеренного выхода упругого резонансного рассеяния ионов  $\text{He}^+$  с энергией  $3.055\text{ МэВ}$  на атомах кислорода в кристалле  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$  вдоль осевого направления  $\langle 001 \rangle$  и вычисленной угловой зависимости выхода процессов близких взаимодействий установлено, что атомы кислорода в цепочках  $\text{O}(3)$ - $\text{O}(4)$  и  $\text{O}(2)$  смещены в направлении, перпендикулярном оси  $\langle 001 \rangle$ . Анализ положения особенности в угловом распределении выхода резонансного упругого рассеяния позволяет сделать вывод о наличии разупорядоченной доли атомов кислорода (т.е. занимающих хаотические положения в плоскости, перпендикулярной направлению  $\langle 001 \rangle$ ), которая формируется из цепочек  $\text{O}(3)$ - $\text{O}(4)$  и  $\text{O}(2)$ . Доля разупорядоченного кислорода составляет величину не более



20%. Максимальное значение величины смещения в направлении, перпендикулярном оси  $\langle 001 \rangle$ , равно 0.3А, а вакансии возникают в цепочках  $O(3)$ - $O(4)$  и  $O(2)$ . Высказано предположение о попарном смещении атомов кислорода в одном направлении с изменением направления смещений на противоположные для следующих пар вдоль цепочек  $\langle 001 \rangle$ , что не нарушает трансляционной симметрии кристалла. Такая модель смещения атомов кислорода и величина смещений не противоречит результатам исследований структуры  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$  с помощью методов рентгеновской и нейтронной дифракции. Эти методы относительно нечувствительны к локальным искажениям строения кислородной подрешетки кристалла и даже сравнительно большие статические или динамические смещения атомов кислорода из идеальных положений трудно определить, если эти смещения не нарушают симметрии структуры решетки.

## Деполаризующие поля, термоупругие напряжения, смещение точки фазового перехода в кристаллах $BaTiO_3 + Nb^{5+}$ , инициированные быстрым изменением их температуры

*Ребецкий Александр Игоревич*

*Тверской Государственный Университет*

*Большакова Наталья Николаевна, к. ф.-м. н.*

*[rebezky-air@mail.ru](mailto:rebezky-air@mail.ru)*

Известно, что при изменении температуры сегнетоэлектрического (СЭ) кристалла происходит перестройка его доменной структуры (ДС)[1]. Целью данной работы было исследование термоиндуцированных процессов перестройки ДС смешанного СЭ  $BaTiO_3$  с примесью  $Nb^{5+}$ , изучение влияния на эти процессы и точку фазового перехода тетрагональная - кубическая фаза скорости изменения температуры  $\dot{T}$ . Исследования проводились поляризационно-оптическим методом. Наблюдение ДС проводилось в проходящем поляризованном свете в плоскости (001). Температура образцов менялась от 20 до 120°C с различными скоростями от 0.1 до 1.7  $Kc^{-1}$  и контролировалась медьконстантановой термопарой. Погрешность измерения температуры ~0.2 К. Объектами исследования являлись тонкие пластинки титаната бария с примесями ниобия, выращенные методом Ремейки и имеющие плоскопараллельные боковые грани. Концентрации примеси в расплаве менялись в пределах 0.1-0.9 моль%.

В настоящей работе было установлено, что при нагревании механически свободных кристаллов  $BaTiO_3 + Nb^{5+}$  в сегнетоэлектрической фазе (СФ) наблюдаются процессы перестройки ДС. Наиболее интенсивная перестройка сегнетоэластической (СЭЛ) ДС происходит при  $T=80-89^\circ C$ , при этом структура всегда остается а- доменной. При фазовом переходе в кубическую парафазу (ПФ) сначала переходят отдельные области кристалла (в основном – крайние), затем происходит движение фазовой границы к центральной части образца. Увеличение  $\dot{T}$  свободных кристаллов  $BaTiO_3 + Nb^{5+}$  приводит к сужению температурной области существования СФ (рис.1). Увеличение концентрации примеси  $Nb^{5+}$  приводит к снижению температуры перехода. Как известно, введение примесей в кристалл  $BaTiO_3$  вызывает образование твердого раствора, вследствие чего изменяются силы связи между ионами элементарной ячейки, ее параметры, а, следовательно, – и СЭ свойства кристалла. Перестройку ДС кристалла  $BaTiO_3$  при изменении его температуры можно объяснить в рамках модели, возникающих в кристалле в условиях градиента температуры термоупругих напряжений [4] и деполаризующих полей [5]. Расчеты для свободной от внешних механических нагрузок бесконечной кристаллической пластинки однородного и монокристаллического кристалла толщины  $2a$ , температура которой меняется только по толщине, дают следующие формулы для термоупругих напряжений –

$$\sigma_i = d_{ij} \alpha_j \frac{\dot{T} a^2}{6k_3} \left( 1 - 3 \left( \frac{x_3}{a} \right)^2 \right), \quad i,j=1,2,6, \quad (\sigma_i = 0, \quad i=3,4,5) \quad (1)$$

и деполаризующих полей –

$$E_3 = \frac{2\pi \dot{T} a^2}{\epsilon_3 k_3} (\gamma - \beta_{3i} d_{ij} \alpha_j) \left( 1 - 3 \left( \frac{x_3}{a} \right)^2 \right), \quad i,j=1,2,6, \quad (2)$$

где  $d_{ij}$  - матрица, обратная матрице коэффициентов упругой податливости,  $\beta_{3i}$  - компоненты матрицы пьезомодулей,  $\alpha_j$  - коэффициент теплового расширения,  $\gamma$  - пьезокоэффициент,  $\epsilon_3$  - компонента диэлектрической проницаемости,  $k_3$  - коэффициент температуропроводности,  $x_3$  - координата.

Видно, что возникающие при непрерывном нагревании кристалла деполаризующие поля линейно зависят от скорости изменения температуры и пропорциональны квадрату его толщины. Таким образом, в достаточно толстых образцах они могут достигать высоких значений. Пусть  $\dot{T} = 0.6 K/c$ ,  $2a = 0.04 см$ , тогда расчеты дают следующие значения для внутренних полей и термоупругих напряжений в центре пластины –  $E_{пьезо} = -4 В/см$ ,  $E_{град} = 61 В/см$ ,  $\sigma_1 = 0.006 МПа$ ,  $\sigma_2 = 120 Па$ , и на ее поверхности –  $E_{пьезо} = 8 В/см$ ,  $E_{град} = -122 В/см$ ,  $\sigma_1 = -0.012 МПа$ ,  $\sigma_2 = -240 Па$ , где  $E_{пьезо}$  обусловлена пьезополяризацией,  $E_{град}$  – неоднородным распределением спонтанной поляризации. Таким образом, пластина оказывается сжатой с краев и растянутой посередине.

Величины термоупругих напряжений малы, и вряд ли такие напряжения могут приводить к перестройке ДС. Две составляющие деполяризующего поля противоположны по знаку, преобладающим является вклад, вносимый неоднородным распределением спонтанной поляризации. На поверхности образца суммарная величина деполяризующего поля близка  $E_{кр}$ , при которой происходит движение  $90^\circ$  ДГ. Стоит отметить, что это поле  $E_3$  должно приводить к с-доменизации образца, чего не наблюдалось экспериментально. С-домены образовывались в свободных кристаллах в редких случаях при их охлаждении из парафазы. Увеличение температуры механически свободных кристаллов в СФ приводит к перестройке их а- доменной структуры.

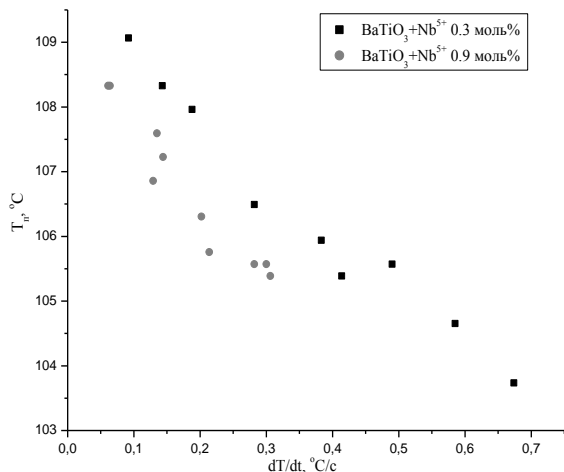


рис.1

Список публикаций:

- [1] Рудяк В.М. Процессы переключения в нелинейных кристаллах. М.Наука.1986. 243с.
- [2] Мамин Р.Ф., Тейтельбаум Г.Б., ФТТ, 1990 том 32, №9 с.2627 – 2632.
- [3] Грезнев Ю.С., Мамин Р.Ф., Мотря С.Ф., ФТТ, 1993 том 35, №1 с.96 – 99.
- [4] Сиротин Ю.И., Шаскольская М.П. Основы кристаллофизики, М. 1979, 640с.
- [5] Румянцев В.С., Богомолов А.А., сб. Сегнетоэлектрики и пьезоэлектрики, Калинин 1978, с. 10.

## Влияние механических напряжений на термоиндуцированные процессы перестройки доменной структуры и точку фазового перехода кристаллов $BaTiO_3$ с примесью $Nb^{5+}$

Ребецкий Александр Игоревич

Тверской Государственный Университет

Большакова Наталья Николаевна, к. ф-м. н.

[rebezky-air@mail.ru](mailto:rebezky-air@mail.ru)

Нами было установлено [1], что в механически свободных кристаллах  $BaTiO_3 + Nb^{5+}$  при непрерывном изменении их температуры (т.е. – в условиях градиента температуры) переход в параэлектрическую фазу (ПФ) осуществляется при более низких температурах ( $\sim 107-108^\circ C$  для  $c=0.3-0.9$  моль%), чем в чистом титанате бария -  $120^\circ C$ , при увеличении  $\dot{T}$  - температура перехода – снижается. Целью данной работы было выяснить, как влияют приложенные внешние одноосные механические напряжения в условиях градиента температуры на термоиндуцированные процессы перестройки доменной структуры (ДС) и точку фазового перехода кристаллов  $BaTiO_3 + Nb^{5+}$ . Исследования проводились поляризационно-оптическим методом[2]. Наблюдение ДС проводилось в проходящем поляризованном свете в плоскости (001). Температура образцов менялась от  $20$  до  $220^\circ C$  с различными скоростями от  $0.1$  до  $1.7 Kc^{-1}$  и контролировалась медьконстантановой термопарой. Погрешность измерения температуры  $\sim 0.2 K$ . Объектами исследования являлись тонкие пластинки титаната бария с примесями ниобия, выращенные методом Ремейки и имеющие плоскопараллельные боковые грани. Концентрации примеси в расплаве менялись в пределах  $0.1-0.9$  моль%.

Исследование влияния величины механических напряжений, приложенных к кристаллу в направлении  $[1\bar{1}0]$ , на точку перехода кристалла в ПФ показало, что с увеличением  $\sigma$  температура перехода  $T_n$  возрастает (рис.1.а). При этом  $dT_n/d\sigma = 3^\circ C/MПа$ . Видно также, что температуры перехода механически зажатых кристаллов в ПФ (в условиях градиента температур) существенно выше температур перехода в ПФ механически свободных кристаллов.

Зависимость температуры перехода СФ – ПФ от

$\dot{T}$  можно объяснить полупроводниковыми свойствами титаната бария в рамках модели, предложенной Р.Ф.Маминым и Г.Б.Тейтельбаумом[2,3]. Сдвиг фазового перехода при быстром изменении температуры относительно равновесной величины определяется выражением (3) –

$$\Delta T = -\frac{k}{\alpha'} \Delta m \quad (3)$$

где  $\Delta m$  – концентрация неравновесных электронов в ловушках. При увеличении температуры  $\Delta m > 0$ , следовательно –  $\Delta T < 0$ . При охлаждении из ПФ имеет место обратное, что и было обнаружено экспериментально.

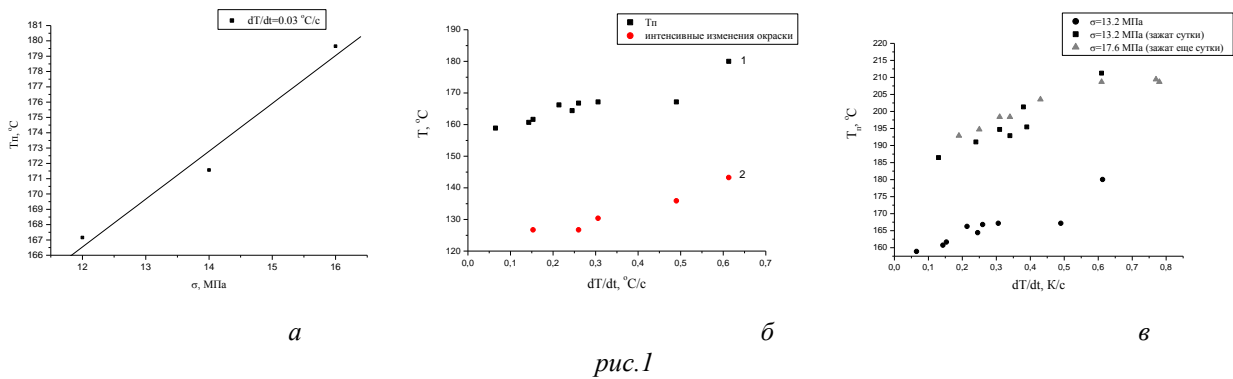


рис.1

Установлено, что в механически зажатых кристаллах с увеличением  $\dot{T}$  происходит возрастание  $T_{\pi}$  (рис.1.б), причем, более существенное (15–20°C), чем снижение  $T_{\pi}$  при увеличении  $\dot{T}$  механически свободных кристаллов. Наиболее интенсивные изменения окраски кристаллов  $\text{BaTiO}_3 + \text{Nb}^{5+}$  с=0.3 моль% при его нагревании, а, следовательно, и перестройка его сегнетоэластической структуры, происходят при  $T \sim 130\text{--}140^\circ\text{C}$  (что примерно на  $10^\circ\text{C}$  ниже, чем для с=0.9 моль%). При этом осуществляется перестройка а- доменных областей. Области ПФ в зажатых кристаллах появляются в центральных частях кристалла, затем происходит (медленное) движение фазового фронта к боковым граням кристалла, к которым приложены механические напряжения.

В настоящей работе было установлено, что температура перехода механически зажатого кристалла, находившегося под длительным воздействием одноосных механических напряжений ( $\sigma=13.2\text{ МПа}$ ) после нескольких процессов перехода СФ – ПФ и обратно, выше температуры перехода этого же кристалла, зажатого при тех же напряжениях, но не подвергавшегося до этого длительному воздействию механических напряжений (рис.1.в). При охлаждении механически зажатых кристаллов из парафазы, в отличие от случая механически свободных кристаллов, часто в равновесной доменной конфигурации присутствуют с- доменные области. Т.о., приложение внешних механических напряжений к кристаллам  $\text{BaTiO}_3 + \text{Nb}^{5+}$  приводит к значительному расширению области существования сегнетофазы. Исследование температурной зависимости диэлектрической проницаемости показало, что в механически зажатых кристаллах максимум  $\epsilon$  сдвигается в сторону более высоких температур, при этом температурный гистерезис отсутствует (рис.2.б), по сравнению с механически свободными кристаллами (рис.2.а).

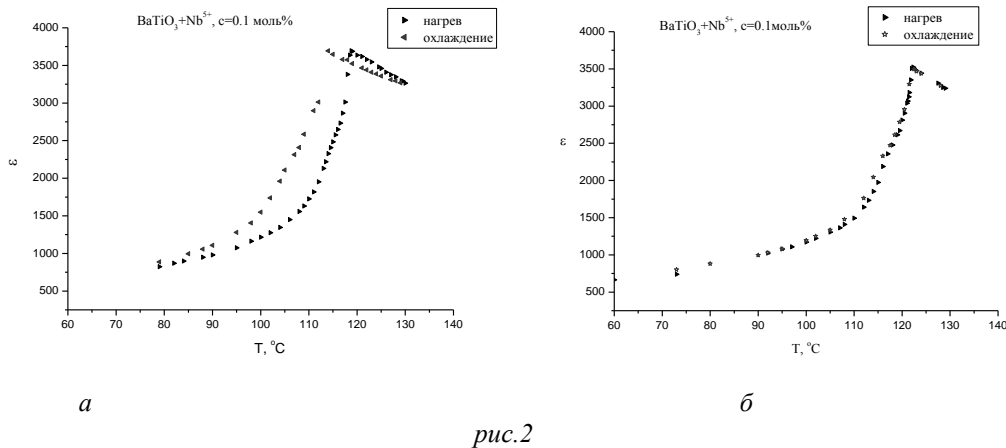


рис.2

Список публикаций:

[1] Большакова Н.Н., Ребецкий А.И., Черешнева Н.Н.// *Магнитные явления: Сб. статей вып. 2 (Материалы всеросс. конф. “Эфф. Баркгаузена и аналогичные физические явления”)/ Под ред. проф. Ломаева Г.В.- Ижевск: изд. ИжГТУ, 2005, 91-97.*  
 [2] Желудев И.С. *Физика кристаллических диэлектриков, М. 1968, 464с.*

## Зоны Бриллюэна подрешеток в некоторых кристаллах кубической сингонии

*Силинин Антон Владимирович*

*Кемеровский Государственный Университет*

*Поплавной Анатолий Степанович, д. ф.-м. н.*

*[silinin@kemsu.ru](mailto:silinin@kemsu.ru)*

В любом сложном кристаллическом соединении можно выделить подрешетки параллельных переносов, соответствующие решеткам Браве, в узлах каждой из которых находятся эквивалентные атомы одного химического элемента. Целесообразно выделять подрешетки с минимальными значениями периодов, при этом ясно, что подрешеток будет не меньше числа химических элементов, входящих в состав кристалла, поскольку одинаковые атомы могут занимать симметрично не эквивалентные позиции и входить в состав разных подрешеток. Выделение подрешеток имеет смысл по той причине, что их число и сочетание определяют физические и физико-химические свойства кристаллов. Так, донорная и акцепторная проводимости связаны с разными подрешетками; ионная проводимость, химические реакции и многие другие процессы нередко обусловлены какой-либо одной подрешеткой, в то время как другие играют роль остова или катализатора.

При слабой гибридизации между кристаллическими подрешетками можно получить зонный спектр кристалла на основе зонных спектров его подрешеток [1-2]. Случай, когда все подрешетки в кристалле относятся к одному типу решетки Браве, является тривиальным. Большой интерес представляет случай, когда они различаются, – тогда в энергетическом спектре подрешеток могут оказаться вырождения, не имеющие места в кристалле. При учете гибридизации между подрешетками все эти вырождения снимутся, однако, если подрешеточная гибридизация мала, то расщепления окажутся небольшими и можно говорить о квазивырождении, обусловленном симметрией какой-либо из подрешеток, отличной от симметрии кристалла.

Перестройка зонных спектров производится на основе перестройки первых зон Бриллюэна (ЗБ) подрешеток в первую ЗБ кристалла на основе следующего соотношения:

$$\mathbf{k}(\Gamma_L) = \mathbf{k}(\Gamma_S) + \sum_{i=1}^3 n_i(\Gamma_L, \Gamma_S) \mathbf{A}_i(\Gamma_L), \quad (1)$$

где  $\mathbf{k}(\Gamma_L)$  и  $\mathbf{k}(\Gamma_S)$  – волновые векторы кристаллической решетки  $\Gamma_L$  и подрешеток  $\Gamma_S$ ,  $\mathbf{A}_i(\Gamma_L)$  – примитивные векторы параллельных переносов кристаллической решетки, а  $n_i(\Gamma_L, \Gamma_S)$  – целые числа.

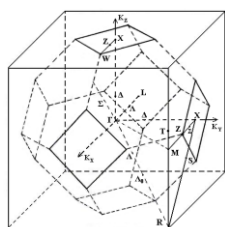


рис. 1

Наиболее простой вид будет иметь перестройка первых ЗБ подрешеток в первые ЗБ кристалла для кубической сингонии ввиду минимального количества параметров решетки. В кубической сингонии существует три типа решеток Браве: простая кубическая (ПК), гранецентрированная кубическая (ГЦК) и объемноцентрированная кубическая (ОЦК). Соответственно, имеется шесть вариантов сочетания данных решеток Браве в кристаллической решетке и подрешетках. Нами были рассмотрены все данные варианты, для которых построены первые зоны Бриллюэна кристаллов и подрешеток и произведено разложение неприводимых звезд волновых векторов подрешеток по неприводимым звездам волновых векторов кристалла. В каждом случае в симметричных точках и на линиях первой ЗБ кристалла возникают трансляционные вырождения, обусловленные свертыванием зонного спектра подрешетки.

В качестве примера приведем сочетание кристаллической решетки ГЦК-типа с подрешеткой ПК-типа. В простейшем случае пространственный период подрешетки должен быть вдвое меньше пространственного периода кристалла. Этот случай соответствует кристаллам со структурой флюорита ( $\text{CaF}_2$ ). Произведено совмещение первых ЗБ кристалла и подрешетки (рис. 1), а также разложение неприводимых звезд волновых векторов подрешеток по неприводимым звездам волновых векторов кристалла:

Кристаллическая решетка		Подрешетка	
Тип звезды	Векторы звезды (ед. $2\pi/a$ )	Тип звезды	Векторы звезды (ед. $2\pi/a$ )
$\Gamma$	(0, 0, 0)	$\Gamma$	(0, 0, 0)
		R	(1, 1, 1)
X	(0, 1, 0)	X	(0, 1, 0)
		M	(1, 1, 0)
L	(1/2, 1/2, 1/2)	$\Lambda_0$	(1/2, 1/2, 1/2)
W	(1/2, 1, 0)	$Z_0$	(1/2, 1, 0)
Z	(2 $\mu$ , 1, 0), -1/4 < $\mu$ < 1/4	Z	(2 $\mu$ , 1, 0), -1/4 < $\mu$ < 1/4 (-1+2 $\mu$ , 0, 1), 1/4 < $\mu$ < 1/2 (1+2 $\mu$ , 0, 1), -1/2 < $\mu$ < -1/4
$\Delta$	(0, 2 $\mu$ , 0), -1/2 < $\mu$ < 1/2	$\Delta$	(0, 2 $\mu$ , 0), -1/2 < $\mu$ < 1/2

		T	(1, 1, 2μ), -1/2<μ<1/2
Λ	(μ, μ, μ), -1/2<μ<1/2	Λ	(2μ, 2μ, 2μ), -1/4<μ<1/4 (-1+2μ, -1+2μ, -1+2μ), 1/4<μ<1/2 (1+2μ, 1+2μ, 1+2μ), -1/2<μ<-1/4
Σ	(2μ, 2μ, 0), -3/8<μ<3/8	Σ	(2μ, 2μ, 0), -3/8<μ<3/8 (-1+2μ, -1+2μ, 1), 3/8<μ<1/2 (1+2μ, 1+2μ, 1), -1/2<μ<-3/8
		S	(2μ, 1, 2μ), -1/8<μ<1/8 (-1+2μ, 0, -1+2μ), 1/8<μ<1/2 (1+2μ, 0, 1+2μ), -1/2<μ<-1/8

Из таблицы видно, что в симметричных точках и на линиях первой ЗБ кристаллической решетки возникают трансляционные вырождения, обусловленные свертыванием зонного спектра подрешетки. Действительно, вычисленный валентный зонный спектр флюорита состоит из двух близко расположенных s-зон и шести слабо расщепленных p-зон фтора, которые как раз и образовались за счет свертывания валентных состояний фтора из первой ЗБ ПК-подрешетки в первую ЗБ ГЦК-решетки.

Работа поддержана грантом № А04-2.9-243 конкурса 2004 года для поддержки научно-исследовательской работы аспирантов государственных образовательных учреждений высшего профессионального образования, находящихся в ведении Федерального агентства по образованию, и грантом № 40/21-202 программы «Развитие научного потенциала высшей школы».

Список публикаций:

[1] Поплавной А.С., Силинин А.В. Кристаллография. 50, № 2 (2005) – принята в печать.

[2] Poplavnoi A.S., Silinin A.V. Crystallography Reports. 50, № 2 (2005) – принята в печать.

## Исследование взаимодействия адсорбированных молекул на поверхности твердых тел Сыркин Илья Сергеевич

Солтанова Елена Владимировна, Фадеев Юрий Александрович  
Кузбасский Государственный Технический Университет  
Фадеев Юрий Александрович, д.ф.-м.н.  
[worm256@mail.ru](mailto:worm256@mail.ru)

Исследование взаимодействия адсорбированных молекул на поверхности твердых тел проводилось с использованием модели, которая представляет собой упругую мембрану. Адсорбированные молекулы на поверхности рассматривались как связанные осцилляторы. Уравнение колебаний мембраны имеет вид:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \left( \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, y, t) \quad (1)$$

где:  $u$  – координаты точек мембраны,  $f$  – вынуждающая сила,  $a$  – коэффициент жесткости мембраны

Адсорбированные молекулы рассматриваются как связанные с элементами мембраны осцилляторы. Описание колебания молекул и узлов мембраны проводится с помощью уравнений Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial T}{\partial \dot{x}_s} + \frac{\partial V}{\partial x_s} = 0, \quad s = 1, 2 \quad (2)$$

или

$$\begin{cases} m_1 \ddot{x}_1 + k_1 x_1 + k_3 (x_1 - x_2) = 0 \\ m_2 \ddot{x}_2 + k_2 x_2 - k_3 (x_1 - x_2) = 0 \end{cases} \quad (3)$$

При этом потенциальная и кинетическая энергия системы задается выражениями:

$$\begin{cases} T = \frac{1}{2} m_1 \dot{x}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \dot{x}_2^2 \\ V = \frac{1}{2} k_1 x_1^2 + \frac{1}{2} k_2 x_2^2 + \frac{1}{2} k_3 (x_1 - x_2)^2 \end{cases} \quad (4)$$

где  $x_1$  – координата молекулы адсорбированного вещества,  $x_2$  – координата узла мембраны,  $m_1$  – масса молекулы,  $m_2$  – масса узла мембраны,  $k_i$  – жесткость соответствующей пружины.

Для решения дифференциальных уравнений колебаний мембраны и колебаний связанных осцилляторов проводится численно с помощью метода сеток. Колебания мембраны рассчитываются по формуле

$$U_{i,j,k+1} = t^2 \left( \frac{U_{i-1,j,k} + U_{i+1,j,k} + U_{i,j-1,k} + U_{i,j+1,k} - 4U_{i,j,k}}{h^2} a^2 + F_{i,j,k} \right) + 2U_{i,j,k} - U_{i,j,k-1} \quad (5)$$

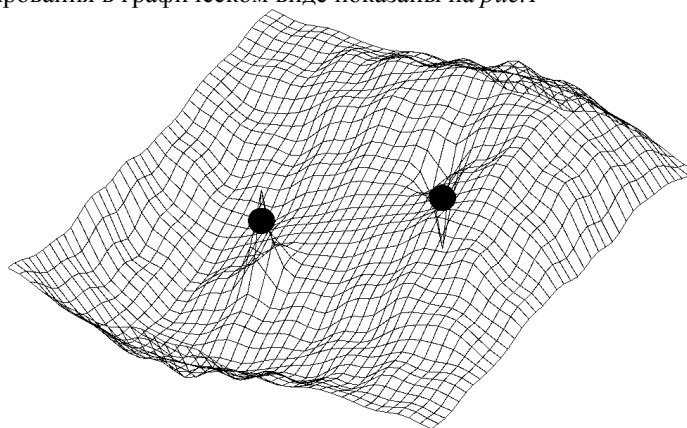
где  $U_{i,j,k}$  – дискретное выражение координат точек мембраны, узел  $(i,j,k)$  соответствует точке  $(x,y,z)$ ,  $h$  – шаг дискретизации.

Колебания связанных осцилляторов рассчитываются по формулам:

$$\begin{cases} X_{i+1}^1 = \frac{-m_1 X_{i-1}^1 + 2m_1 X_i^1 - k_1 X_i^1 h^2 - k_3 X_i^1 h^2 + k_3 X_i^2 h^2}{m_1} \\ X_{i+1}^2 = \frac{-m_2 X_{i-1}^2 - 2m_2 X_i^2 + k_2 X_i^2 h^2 - k_3 X_i^1 h^2 + k_3 X_i^2 h^2}{m_2} \end{cases} \quad (6)$$

Результаты моделирования представлены трехмерным массивом, значения элементов которого определяют аппликаты точек мембраны с течением времени.

Результаты моделирования в графическом виде показаны на *рис. 1*



*рис. 1.*

## Механические свойства неорганических монокристаллических световодов

*Сыркин Илья Сергеевич*

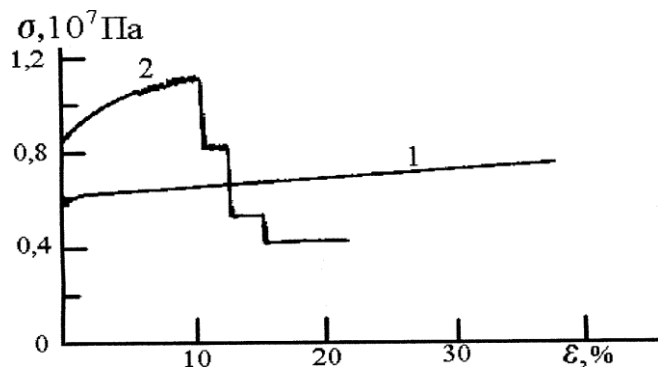
*Коньшева Надежда Ивановна, Фадеев Юрий Александрович*

*Кузбасский Государственный Технический Университет*

*Фадеев Юрий Александрович, д.ф.-м.н.*

*[worm256@mail.ru](mailto:worm256@mail.ru)*

В настоящей работе проведено сопоставление механических свойств монокристаллических волокон, сердцевина которых изготовлена из  $\text{TlBr}$ , а светоотражающая оболочка представляет собой твёрдый раствор  $\text{TlBr}_{0.5}\text{Cl}_{0.5}$ . На *рис. 1.* представлены типичные диаграммы растяжения отрезков однослойных и двухслойных волокон. Кривая деформации однослойного волокна  $\text{TlBr}$  (*рис. 1.*, кривая 1) характерна для монокристаллов.



*рис. 1*

Диаграмма растяжения двухслойного волокна (рис.1., кривая 2) имеет ступенчатый вид. Другой характерной её особенностью является скачкообразное изменение деформирующего напряжения, которое особенно отчетливо наблюдается на участке диаграммы вскоре после предела текучести и до первого резкого спада нагрузки. Установлено, что скачкообразное изменение деформирующего напряжения связано с зарождением в образце на границе сердцевина-оболочка продольной трещины и ее неравномерным продвижением по образцу, сопровождающемся постепенным раскрытием трещины. Резкий спад нагрузки происходит в результате образования в оболочке ответвляющейся от продольной поперечной трещины, вследствие чего часть поперечного сечения оболочки оказывается ненагруженной. Образование новой поперечной трещины в оболочке приводит к спаду нагрузки. Разрушение сердцевины двухслойного волокна происходит на заключительном этапе деформации.

Установлено, что двухслойное волокно более прочное, чем чистые волокна TiB<sub>2</sub>, но менее пластичное. Уже после деформации 6..7% на границе сердцевина-оболочка зарождается продольная трещина, первые поперечные трещины в оболочке образуются обычно после относительного удлинения 10..12%, сердцевина из TiB<sub>2</sub> разрушается после деформации 18..20%. Однослойные монокристаллические волокна TiB<sub>2</sub> выдерживают без разрушения деформацию 50%. Средние значения критических сдвиговых напряжений были равны 1.9 и 3.8 Мпа для однослойного и двухслойного волокна соответственно.

Более высокие прочностные свойства двухслойных волокон, по-видимому, обусловлены упрочняющим действием примеси хрома, содержание которого в оболочке очень велико и который в виду высокой температуры выращивания волокон, несомненно, диффундирующий в сердцевину. Именно этим можно объяснить меньшую пластичность сердцевины двухслойного волокна по сравнению с чистым волокном TiB<sub>2</sub>.

Обнаруженные в работе особенности разрушения двухслойных волокон связаны с различием параметров элементарной ячейки внутреннего и наружного слоёв волокна, а следовательно, и с различием модулей упругости. Поэтому при достижении определенной степени удлинения двухслойного волокна внутреннее напряжение в оболочке оказывается выше, чем в сердцевине. Особенно сложное напряженное состояние возникает на границе слоёв. Неудивительно, что именно в этой области двухслойного волокна зарождается продольная трещина, а поперечное разрушение захватывает сначала оболочку и лишь затем сердцевину.

Таким образом, механические свойства двухслойных волокон в значительной степени определяются различием упругих модулей слоёв волокна. Это необходимо учитывать при подборке состава сердцевины и светоотражающей оболочки двухслойных волокон для обеспечения не только требований, связанных с прохождением светового потока, но и высоких эксплуатационных свойств этих волокон.

## **Влияние слабых постоянных и переменных магнитных полей на кинетику синтеза оксидов тантала и ниобия**

***Тихонов Никита Дмитриевич***

*Петрозаводский Государственный Университет*

*Малиненко Владимир Пантелеймонович, к.ф.-м.н.*

*[nik-1982@mail.ru](mailto:nik-1982@mail.ru)*

В последнее время были обнаружены эффекты, связанные с влиянием слабых постоянных и переменных магнитных полей ( $B < 1$  Тл) на структуру и свойства различных материалов [1-7, 9]. На данный момент теория влияния слабого магнитного поля (СМП) на структуру и свойства материалов находится в процессе создания и уже существуют публикации, описывающие возможные механизмы влияния СМП [8, 9]. Публикации по данной тематике на данный момент отражают область, связанную с влиянием СМП на готовые образцы, которые в процессе исследования подвергаются воздействию СМП.

В связи с этим нами предпринята попытка рассмотреть влияние СМП на процесс формирования оксидных пленок переходных металлов. В качестве материалов нами были взяты металлы тантал и ниобий, пленочные оксиды которых формировались по традиционной методике с наложением постоянного или переменного СМП. Проводились три вида экспериментов на образцах тантала и ниобия равной площади: формирование оксидных пленок металла без внешних магнитных полей, а также в постоянном СМП ( $B = 0,54$  Тл) и в переменном СМП (с амплитудой  $B = 0,11$  Тл). СМП было ориентировано перпендикулярно электрическому полю. В ходе данных экспериментов были обнаружены следующие закономерности:

- Сохраняется линейность зависимостей  $U(t)$  и  $1/C_{уд} = f(U)$  при наложении постоянного и переменного СМП.

- Постоянное СМП не вызывает заметного изменения в скорости образования оксида, контролируемой ( $dU/dt$ ), в то время как переменное СМП вызывает заметное изменение в скорости роста. Для тантала характерно замедление скорости формовки при воздействии переменного СМП:  $dU/dt[B=0Тл]=dU/dt[B(-)=0,54Тл]= 0,23$  V/s, а  $dU/dt[B(\sim)=0,11Тл]= 0,20$  V/s, что приводит к разности во времени около 70 s при формировании оксидной пленки тантала при напряжении до 200 V. Для ниобия также характерно замедление

скорости в переменном СМП:  $dU/dt[B=0Тл]=dU/dt[B(-)=0,54Тл] = 0.26 \text{ V/s}$ , а  $dU/dt[B(\sim)=0,11Тл]= 0,24 \text{ V/s}$ , что приводит к разности во времени около 50 s при формировании оксидной пленки ниобия при напряжении до 150 V.

• Постоянное СМП не вызывает заметного изменения в численном значении емкости системы (электроды + электролит + оксидный слой тантала или ниобия) вплоть до максимальных напряжений формовки (200 и 150 V соответственно), а переменное СМП вызывает изменение емкости системы, так что с оксидом тантала емкость увеличивается на 30 nF, в то время как с оксидом ниобия емкость уменьшается на 50 nF (данные изменения емкости соответствуют максимальным напряжениям при формировании оксидных пленок).

Обнаружено влияние переменного СМП на скорость процесса образования пленочных оксидов переходных металлов тантала и ниобия. Сравнительные временные характеристики протекания процессов формирования оксидов в отсутствие СМП и при скрещенных электрических и СМП значимо различны.

Изменения емкости системы с оксидами тантала и ниобия полученными в переменном СМП связаны именно с емкостью самих оксидных пленок, причем возможно изменение толщины или диэлектрической проницаемости либо толщины и диэлектрической проницаемости одновременно. Изменение этих параметров может быть обусловлено структурными изменениями при формировании оксидной пленки, в условиях воздействия СМП.

Относительно механизма влияние СМП можно высказать предположение, что процесс химических реакций формирования структуры оксидов является спин зависимым от магнитного поля как это указано в литературе. Проведенные ранее работы на оксиде иттрия показали изменения в формировании атомной структуры под влиянием постоянного СМП.

Дальнейшие исследования особенностей полученных оксидных пленок будет направлено на определение оптических свойств и изучение электрических характеристик полученных оксидных пленок.

Список публикаций:

- [1] Левин М.Н., Семенова Г.В., Сушкова Т.П., Постников В.В., Агапов Б.Л. «Влияние импульсного магнитного поля на реальную структуру твердых растворов в системе Sb-As» // ФТТ, 2003г., том 45, вып. 4.
- [2] Левин, В. В. Постников, М.Ю. Палагин «Селективное воздействие слабого постоянного магнитного поля на кристаллы триглицинсульфата» // ФТТ, 2003г., том 45, вып. 9.
- [3] Левин М.Н., Постников В. В., Палагин М. Ю. «Селективное воздействие слабого магнитного поля на сегнетоэлектрические кристаллы с водородными связями» // Письма в ЖТФ, 2003 г., том 29, вып. 12.
- [4] Левин М.Н., Семенов В.Н., Наумов А.В. «Импульсная магнитная обработка кремниевых подложек для осаждения тонких пленок методом пульверизации» // Письма в ЖТФ, 2001 г., том 27, вып. 7.
- [5] Левин М.Н., Семенов В.Н., Метелева Ю.В. «Воздействие импульсных магнитных полей на тонкие слои Cd<sub>0.5</sub>Zn<sub>0.5</sub>S» // Письма в ЖТФ 2001 г., том 27 вып. 10.
- [6] Левин М.Н., Постников В.В., Палагин М.Ю., Косцов А.М. «Воздействие слабых импульсных магнитных полей на кристаллы триглицинсульфата» // ФТТ 2003 г., том 45, вып. 3.
- [7] Левин М. Н., Семенова Г. В., Сушкова Т. П., Долгополова Э. А., Постников В. В. «Воздействие импульсных магнитных полей на реальную структуру кристаллов арсенида индия» // Письма в ЖТФ, 2002 г., том 28, вып. 19.
- [8] Молоцкий М. И. «Возможный механизм магнитопластического эффекта» // ФТТ, т. 33, №10, 1991 г.
- [9] Левин М. Н., Зон Б. А. «Воздействие импульсных магнитных полей на кристаллы Cz-Si» // ЖЭТФ, т. 111, вып. 4, 1997 г.

## Модель выпрыгивания краевой дислокации на свободную поверхность

*Тихонова Татьяна Александровна*

*Кузбасская Государственная Педагогическая Академия*

*Неверов Валерий Владимирович, д.ф.-м.н.*

*[Tat-82@mail.ru](mailto:Tat-82@mail.ru)*

Пластические сдвиги и дислокации переносят массу. С каждой краевой дислокацией связаны две области, массовая плотность которых отличается от средней (*рис.1*). В той части плоскости сдвига, где имеется экстраплоскость, расположена область, в которой массовая плотность повышена, а в другой части, симметричной относительно плоскости сдвига, находится область с пониженной массовой плотностью. При движении дислокации происходит перемещение этих областей, которое сопровождается переносом массы. По разные стороны от области сдвига масса перемещается в противоположных направлениях. По мере приближения краевой дислокации к свободной поверхности ее упругое поле ослабевает, и увеличивается масса, выходящая на поверхность. В месте выхода дислокации на свободную поверхность образуется ступенька. Целью данного исследования является разработка метода вычисления массы, переносимой краевой дислокацией ( $M_1$ ), и массы, выходящей на свободную поверхность ( $M_2$ ), и получение зависимостей значений этих масс от расстояния до свободной поверхности ( $h$ ). Очевидно, что масса  $M$ , представляющая собой результат суммирования массы  $M_1$  и массы  $M_2$  должна быть величиной постоянной на всем пути скольжения дислокации.



Масса  $M_1$  была рассчитана нами по формулам (1), (2), (3). Мы рассматриваем плоское тело, которое разбиваем на элементарные ячейки  $\Delta x \times \Delta y$ , плотность которых можно считать постоянной величиной. Суммирование производим по участку плоскости размером  $L \times L$ , где  $L = 100b$  ( $b$  – вектор Бюргерса). Формулы для компонент напряжений  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  упругого поля одиночной краевой дислокации, расположенной вблизи свободной поверхности, были взяты из Хирт Дж., Лоте Н. Теория дислокаций. М.: Атомиздат, 1972. – 600 с. Вычисления производим с помощью математического пакета «Mathcad».

$$M_1(h) = \sum_i \sum_j \Delta m(h) = \sum_i \sum_j \Delta \rho(x_i, y_j, h) \cdot \Delta x \cdot \Delta y \quad (1),$$

$\Delta \rho(x, y, h) = -\rho_0 \cdot \frac{p(x, y, h)}{K}$  (2), где  $\rho_0$  – средняя плотность,  $p(x, y, h)$  – гидростатическое давление (3),  $K$  – коэффициент всестороннего сжатия.

$p(x, y, h) = \frac{(1-\nu) \cdot (\sigma_{xx}(x, y, h) + \sigma_{yy}(x, y, h))}{3}$  (3), где  $\sigma_{xx}$  и  $\sigma_{yy}$  – компоненты напряжений упругого поля краевой дислокации, расположенной вблизи свободной поверхности,  $\nu$  – коэффициент Пуассона.

Для расчета массы  $M_2$  находим интеграл от смещения по области сечения (4).

$$M_2(h) = \rho_0 \cdot \int_{-L}^L u_{xx}(0, y, h) dy \quad (4), \text{ где } u_{xx}(0, y, h) \text{ – проекция вектора смещения на свободную поверхность } x=0.$$

Полная масса  $M$  находится простым суммированием  $M_1$  и  $M_2$ . Искомые зависимости масс  $M_1$ ,  $M_2$  и  $M$  от расстояния до свободной поверхности приведены ниже (рис.2). Полученные результаты подтверждают наше предположение о том, что движение краевой дислокации сопровождается переносом массы.

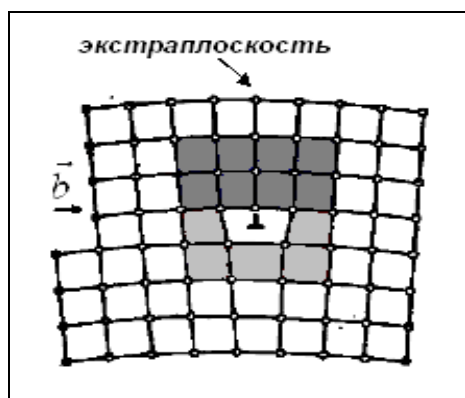


рис. 1

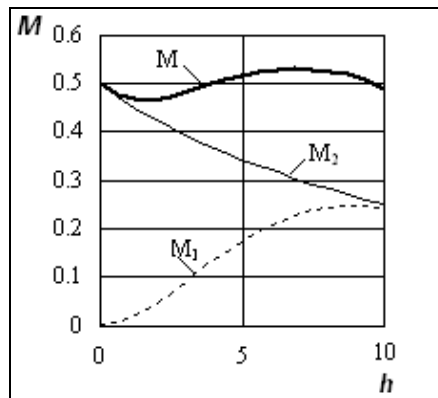


рис. 2

### Зонная структура карбоната лития

*Федоров Игорь Александрович*

*Кемеровский Государственный Университет*

*Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.м.н.*

*[f992fia@ic.kemsu.ru](mailto:f992fia@ic.kemsu.ru)*

В настоящей работе рассматривается зонная структура карбоната лития имеющего базоцентрированную решетку с числом формульных единиц равным двум. В кристалле  $Li_2CO_3$  атомы лития и кислорода образуют с углеродом неэквивалентные связи с расстояниями:  $C-O1=1.267 \text{ \AA}$ ,  $C-O2=1.290 \text{ \AA}$ ,  $Li-C=2.791 \text{ \AA}$ . Таким образом, число подрешеток равно четырем.

Расчет зонной структуры выполнен в рамках теории функционала локальной электронной плотности методом псевдопотенциала по программе описанной в [1]. В качестве базиса для волновой функции использовались численные атомные  $sp^3d^5$  псевдоорбитали, а затем производилось разложение по 2500 плоским волнам. Плотность состояний  $N(E)$  вычислена методом интерполирования энергетических зон симметризованными рядами Фурье.

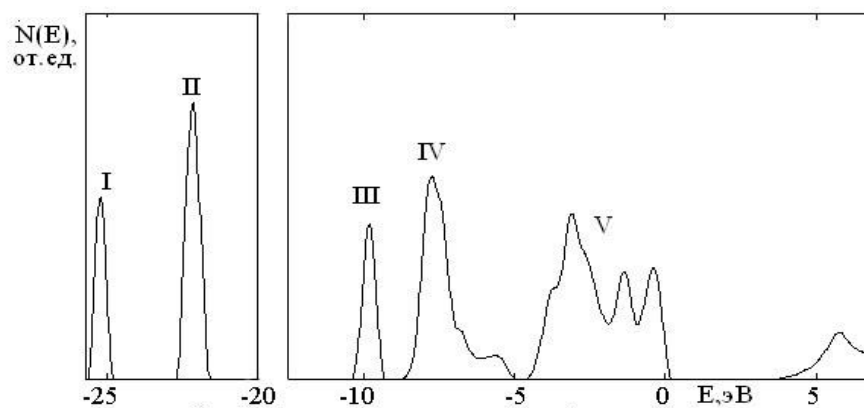


Рис.1 Плотность состояний карбоната лития

На рис.1 показана плотность состояний. За нуль энергии выбрана вершина валентной зоны. В валентной области нижние связки отделены друг от друга широкими запрещенными зонами. Число связок в нижней части равно двум. Связка II происходит из двукратно вырожденной молекулярной орбитали  $1e'$  свободного аниона  $CO_3^{2-}$  и в кристалле происходит снятие вырождения. Используя карты парциальной электронной плотности можно выяснить состав связок валентной зоны. В образовании самой нижней связки участвует в основном s-состояния кислорода, при этом вклад O2 больше. Связка II состоит из двух подзон, которые не видны в плотности состояний, при этом одна состоит в основном из s-состояний O1, а другая из s-состояний O2. Связка III состоит из s-состояний O1 и O2, при этом вклад O2 больше чем O1. В образование связки IV основной вклад вносит кислород, но теперь углерод также начинает играть заметную роль и еще одна особенность, что начинают сильно проявляться p-состояния. В образовании связки V основной вклад вносят p-состояния кислорода. Минимальный межзонный переход имеет прямой характер.

Список публикаций:

[1] Журавлев Ю.Н., Басалаев Ю.М., Поплавной А.С. Известия вузов. Физика. – 2000. - № 3. – С. 96

## Спин-орбитальное расщепление в полупроводниковых соединениях iii-v группы

Ханин Даниил Владимирович

Кулькова Светлана Евгеньевна

Институт Физики Прочности и Материаловедения СО РАН

Кулькова Светлана Евгеньевна, д.ф.-м.н.

[daniil@ispms.tsc.ru](mailto:daniil@ispms.tsc.ru)

Известно, что фотокатоды на основе полупроводниковых наноструктур используются в качестве источников поляризованных электронов. Явление испускания пучков поляризованных по спину электронов с поверхности GaAs, облучаемой светом с круговой поляризацией интенсивно изучается с середины семидесятых годов [1], поскольку имеет широкое технологическое приложение в физике высоких энергий. Двойные полупроводниковые соединения элементов III-V группы исследовались как полуэмпирическими, так и первопринципными зонными методами [2]. В основном современные методы, такие как полно-потенциальные линейные методы присоединенных плоских волн (ПП ЛППВ) и “muffin-tin” орбиталей (ПП ЛМТО) недооценивают значение фундаментальной щели на 40-50%, хотя позволяют правильно воспроизвести ее тип [3]. Значительно меньше работ выполнено в рамках первопринципных методов для тройных соединений элементов указанных выше групп [2]. В настоящей работе представлены результаты расчетов электронной структуры серии тройных полупроводниковых соединений ( $Al_{0.5}Ga_{0.5}As$ ,  $Ga_{0.5}In_{0.5}As$ ,  $In_{0.5}As_{0.5}Sb$ ,  $Ga_{0.5}As_{0.5}Sb$ ,  $Ga_{0.5}In_{0.5}Sb$  и  $Ga_{0.5}In_{0.5}P$ ) с учетом спин-орбитального взаимодействия.

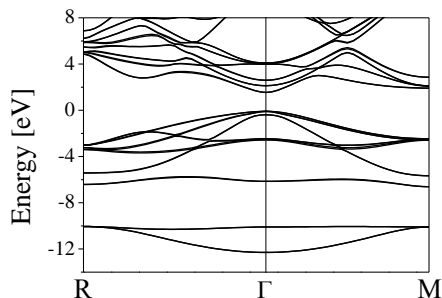


рис. 1. Зонный спектр для системы  $Al_{0.5}Ga_{0.5}As$  с учетом спин-орбитального взаимодействия

Электронная структура рассчитывалась с использованием ПП ЛППВ метода (программный код Wien2K [4]). Для обменно-корреляционного потенциала использовалось несколько приближений, в том числе локальной плотности (LDA), обобщенного градиента (GGA) и так называемое приближение точного обменного потенциала в рамках GGA [5]. Разложение кристаллического потенциала и зарядовой плотности внутри МТ-сфер ограничивалось значением  $l_{max}=10$ . Несферические вклады в зарядовую плотность и потенциал

внутри сфер учитывались до  $l_{max}=4$ . В межсферной области суммирование потенциала по плоским волнам ограничивалось значением вектора обратной решетки, равным  $|G|=8 \text{ ат.ед.}^{-1}$ . Радиусы атомных сфер были выбраны равными 2.2 ат.ед. для P, Al, Ga, As и 2.4 ат.ед. для In и Sb. Интегрирование в k-пространстве проводилось для 200 точек в зоне Бриллюэна. Самосогласование считалось достигнутым, если изменение полной энергии не превышало  $10^{-5}$  Рид. Для вычисления равновесных параметров решетки проводилась объемная оптимизация. Равновесные параметры определялись из условия минимума полной энергии. Были получены следующие значения параметров решетки: 5.654, 5.895, 6.400, 6.216, 6.301, 5.629 Å для  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ ,  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}$ ,  $\text{In}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{Sb}$ ,  $\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{Sb}$ ,  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$  и  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$ , соответственно. На рисунке 1 приведен спектр для системы  $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{As}$ . Ширина фундаментальной щели с учетом спин-орбитального взаимодействия равна 1.07 эВ. Отметим, что это значение практически не отличается от полученного для GaAs. В этом случае значения спин-орбитального расщепления в точках  $\Gamma$  и R равны  $\Delta_0=0.31$  эВ и  $\Delta_1=0.20$  эВ, что хорошо согласуется с результатами 0.34 и 0.21 эВ, полученными в работе [2]. Заметим, что в случае GaAs и AlAs значения  $\Delta_0$  равны 0.32 (0.34 эВ эксперимент [2]) и 0.31 эВ (0.28 эВ [2]), а  $\Delta_1$  равно 0.20 и 0.18 эВ (0.22 и 0.19 эВ [2]) соответственно. Следует обратить внимание, что при увеличении объема ячейки ( $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{Sb}$ ,  $\text{In}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{Sb}$ ,  $\text{Ga}_{0.5}\text{As}_{0.5}\text{Sb}$  и) по сравнению с GaAs увеличивается также величина спин-орбитального расщепления (0.65, 0.55 и 0.51 эВ), тогда как введение фосфора вместо сурьмы в системе  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$  приводит к уменьшению расщепления до 0.1 эВ. Детально анализируются изменения электронных характеристик, таких как полные и локальные плотности состояний, распределения зарядовой плотности с изменением состава гетероструктур. Результаты показывают, что присутствие сурьмы в системах, образующих гетероструктуру приводит к наибольшему спин-орбитальному расщеплению вершины валентной зоны.

Список публикаций:

- [1] D.T. Pierce, F. Meier, *Phys. Rev.* **B13**, 5484 (1976).  
 [2] N.E. Christensen, E. Molinari, G.B. Bachelet, *Solid State Comm.* **56**, 125 (1985).  
 [3] Д.В. Ханин, С.Е. Кулькова, *Известия ВУЗов Физика* **1**, 63 (2005).  
 [4] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, *Wien2k, Vienna University of Technology, Austria, 2001, ISBN 3-9501031-1-2*  
 [5] E. Engel, S.V. Vosko, *Phys. Rev.* **B47**, 13164 (1993).

## Морфологическая устойчивость двумерного цилиндрического кристалла при линейной и квадратичной зависимостях локальной скорости роста от пересыщения

**Червонцева Евгения Александровна**

*Мартюшев Леонид Михайлович*

*Уральский Государственный Технический Университет (УПИ)*

*Мартюшев Леонид Михайлович, к.ф.-м.н.*

[Chervontseva@rambler.ru](mailto:Chervontseva@rambler.ru)

Поведение фазовой границы кристалла при наличии возмущений бесконечно малой амплитуды (линейный анализ) проанализировано достаточно подробно [1]. Однако задач с возмущением формы гармониками малой, но конечной амплитуды (слабонелинейный анализ), несмотря на большой интерес с практической точки зрения, рассмотрено очень мало, что связано с их громоздкостью и сложностью. В литературе имеется расчет кристаллических зародышей простой геометрической формы (сферической, цилиндрической) в предположении бесконечно быстрых кинетических процессов на поверхности (диффузионный режим) [2-4]. Было обнаружено, что критический размер устойчивости кристалла при увеличении величины возмущения практически всегда уменьшается. Существенной ограниченностью вышеупомянутых работ являлось предположение о диффузионном механизме роста, т.е. кинетика присоединения частиц к поверхности полностью игнорировалась. В работе [5] нами был ликвидирован этот недостаток и проведен анализ на морфологическую устойчивость двумерного цилиндрического кристалла с произвольным режимом роста в предположении, что локальная скорость роста кристалла пропорциональна пересыщению. Впервые были получены данные о поведении критического радиуса устойчивости в зависимости от частоты и амплитуды возмущения при промежуточном и кинетическом режимах роста кристалла. Однако, помимо рассмотренной линейной зависимости скорости роста от пересыщения, достаточно распространенным случаем при кристаллизации является квадратичная зависимость (например, при дислокационном механизме роста при небольших пересыщениях). Анализ этого случая отсутствует, что и составило предмет настоящего исследования.

Математическая постановка задачи подобна [5] за исключением условия на границе кристалла, где поток вещества к кристаллу пропорционален квадрату пересыщения у поверхности. Задача решалась традиционно [5] с помощью разложения по малому параметру  $\delta$  до третьего порядка, поле концентрации  $u(r, \varphi)$  представлялось в виде:

$$u(r, \varphi) = u_0(r) + u_1(r, \varphi)\delta + u_2(r, \varphi)\delta^2 + u_3(r, \varphi)\delta^3 \quad (1)$$

где  $u_i$  коэффициенты разложения, выражения для которых явно найдены. Используя (1) была найдена локальная скорость роста кристалла. Полученная скорость роста разлагалась в тригонометрический ряд вблизи радиуса невозмущенного кристалла. Из анализа знака коэффициента при базовой гармонике (соответствует начальному накладываемому возмущению) был найден размер (радиус устойчивости) в виде:

$$\rho = \rho_0 + \rho_2 \delta^2 \quad (2)$$

где для  $c_2$  имеется явное аналитическое выражение, а  $c_0$  получается из численного решения найденного нелинейного уравнения.

Найдены зависимости линейного радиуса устойчивости  $c_0$  и квадратичной поправки  $c_2$  от режимов роста кристалла (диффузионный, промежуточный и кинетический), а также от частоты возмущающих гармоник. Обнаружено уменьшение радиуса устойчивости кристалла при увеличении амплитуды возмущения для возмущающих гармоник начиная с третьей при любых условиях. Проведено сравнение полученных результатов с результатами работы [5] и выявлено их качественное совпадение. Однако, количественный анализ показал, что учет квадратичной зависимости локальной скорости роста от пересыщения приводит к увеличению линейного радиуса устойчивости кристалла. Это объясняется тем, что при нелинейной кинетике присоединения частиц к поверхности в случае относительно небольших пересыщений (которые и рассматриваются в работе) значение локальной скорости роста выступа будет меньше, чем при линейной кинетике. Поэтому в случае квадратичной зависимости при одном и том же пересыщении кристалл будет дольше оставаться устойчивым.

Представленный здесь слабонелинейный анализ позволяет изучать морфологическую устойчивость кристалла только при малых конечных возмущениях границы. Проведение полного аналитического анализа на устойчивость в случае произвольных возмущений представляется невыполнимым вследствие существенной громоздкости. Поэтому дальнейшим продолжением работы по изучению начальной стадии потери морфологической устойчивости фронта кристаллизации станет численный анализ рассматриваемой задачи с помощью математических пакетов MatLab и FemLab.

Список публикаций:

- [1] Coriell S.R., McFadden G.B. // *Handbook of Crystal Growth*, ed. by D.T.J. Hurle, North-Holland, Amsterdam (1993) Vol.1, Part B. p.785-857  
 [2] Brush L.N., Sekerka R. F. and McFadden G. B. // *J. Cryst. Growth* **100** (1990) 89-108  
 [3] Debroy P.P. and Sekerka R. F. // *Phys. Rev. E* **51** . ( 1995) 4608-4620  
 [4] Debroy P.P. and Sekerka R. F. // *Phys. Rev. E* **53** (1996) 6244-6252  
 [5]. Мартюшев Л.М., Сальникова Е.М., Червонцева Е.А. // *ЖЭТФ*, 125 вып.5 (2004) 1128.

## **Разделение влияния поверхностной неоднородности и заглабления электрически активных состояний на кривые нормированной проводимости в МДП-структурах**

**Яковлев Роман Александрович**

*Авдеев Николай Алексеевич, Климов Игорь Викторович*

*Петрозаводский Государственный Университет*

*romnd@mail.ru*

В реальных МДП-структурах на поверхности полупроводника существуют флуктуации поверхностного потенциала, а в диэлектрике электронные состояния, способные обмениваться носителями заряда с полупроводником путём туннелирования. Оба этих эффекта приводят к изменению формы экспериментальных кривых нормированной проводимости.

Выражение для нормированной проводимости, в котором учитывается влияние флуктуаций поверхностного потенциала и заглаблений, выглядит следующим образом:

$$\frac{Gp}{\omega} = \frac{qN_{ss}}{4\chi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[ \frac{\ln(1+x^2)}{x} + \arctg\left(\frac{1}{x}\right) - \frac{\ln(1+A^2x^2)}{Ax} - 2\arctg\left(\frac{1}{Ax}\right) \right] P(\psi_s) d\psi_s \quad (1)$$

где  $Gp$  - эквивалентная параллельная проводимость,  $\omega$  - частота сигнала,  $q$  - заряд электрона,  $N_{ss}$  - плотность ПС,  $\tau$  - постоянная времени ПС,  $x = \omega\tau$ ,  $A = \exp(2\chi d)$ ,  $\chi$  - коэффициент затухания волновой функции электрона в диэлектрике,  $P(\psi_s)$  - функция распределения поверхностного потенциала относительно среднего значения.

Для изучения характера влияния обоих механизмов уширения при одновременном их воздействии проведены численные расчеты кривых нормированной проводимости.

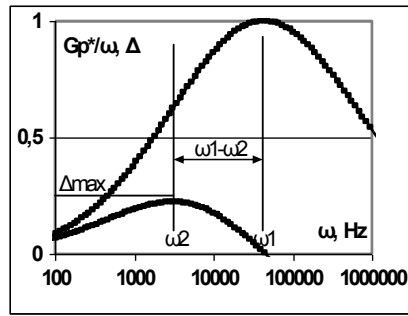


рис.1 Зависимость проводимости, приведённой по максимуму к единице  $Gp^*/\omega$  и производной  $\Delta$  от частоты

Численное исследование производной нормированной проводимости по логарифму частоты  $\Delta = \frac{d(Gp^*/\omega)}{d(\ln \omega \tau)}$

(рис.1) показало, что частота перегиба  $\omega_2$  низкочастотной ветви кривой  $Gp^*/\omega$  и частота максимума  $\omega_1$  зависят от величины дисперсии потенциала  $\sigma_s$  и глубины залегания электронных состояний  $d$ . Вклад флуктуаций потенциала и заглупления состояний сказывается на значении производной в точке перегиба  $\Delta_{\max} = \Delta \Big|_{\omega=\omega_2}$ . Расстояние  $\omega_1 - \omega_2$  и значение  $\Delta_{\max}$  используются в качестве параметров, позволяющих оценить вклад флуктуаций потенциала и заглупления состояний в уширение кривой.

Использование туннельной модели позволяет аппроксимировать зависимости  $\Delta_{\max}$  и  $\omega_1 - \omega_2$  от величины заглупления  $d$  следующими выражениями:

$$d = 0,61 - 2,73 \ln(\omega_1 \tau_0 - \omega_2 \tau_0), \quad \eta \Big|_{\omega=\omega_2} = \Delta_{\max} * (0,785 + 1,138 \ln(d)) \quad (2)$$

Функция  $\eta = \frac{\ln(1 + (A \omega \tau_0)^2)}{A \omega \tau_0} - \frac{\ln(1 + (\omega \tau_0)^2)}{\omega \tau_0}$  представляет собой производную нормированной

проводимости для модели заглуплений приведённую к безразмерному виду за счёт деления на  $qN_{ss}/4\chi$ .

Для модели заглуплений необходимо рассчитать параметры заглуплённых состояний: глубина залегания  $d$  и постоянная времени состояний на поверхности  $\tau_0$ . На первой стадии расчётов предполагается, что флуктуации поверхностного потенциала отсутствуют. Система уравнений (2) позволяет определить постоянную времени заглуплённых состояний и глубину их залегания.

Чтобы проверить корректность применения туннельной модели, необходимо ввести дополнительное условие в виде 3-го уравнения, которое определяется зависимостью положения максимума кривой  $Gp^*/\omega$  от величины заглупления  $d$ :

$$\eta \Big|_{\omega=\omega_1} = 0 \quad (3)$$

Система уравнений (2-3) имеет общее решение, если отсутствуют флуктуации потенциала. Отсутствие общего решения после подстановки экспериментальных параметров говорит о заметном влиянии флуктуаций поверхностного потенциала в данной МДП-структуре.

Вклад флуктуаций можно определить при помощи операторного метода решения интегральных уравнений. Выражение (1) записывается в виде свёртки функций:

$$f(\omega) = \int y(\omega) * k(\omega - \omega') \quad (5)$$

где  $f(\omega)$  – экспериментальная зависимость нормированной проводимости, обусловленная, в общем случае, вкладом флуктуаций и заглуплений;  $y(\omega)$  – нормированная проводимость, обусловленная только заглуплениями и  $k(\omega - \omega')$  – ядро уравнения, отвечающее за вклад флуктуаций потенциала. Используя экспериментальные данные  $f^{\wedge}(z)$ , путём выбора оператора флуктуаций  $k^{\wedge}(z)$ , можно найти решение  $y^{\wedge}(z) = f^{\wedge}(z) / k^{\wedge}(z)$  удовлетворяющее системе (2-3). Значение  $d$ , полученное решением системы при выбранном  $\sigma_s$ , определяет величину заглупления.

## Моделирование темного тока фотодиодов на основе CdHgTe

Ярцев Андрей Викторович

Новосибирский Государственный Университет

Овсяк Виктор Николаевич, д.ф-м. н.

[jartsev@ngs.ru](mailto:jartsev@ngs.ru)

Теллурид кадмия ртути (КРТ) является основным и практически единственным материалом, удовлетворяющий требованиям промышленности и ВПК для обеспечения качественного теплового изображения в спектральном диапазоне 3-5 мкм и 8-12 мкм при наблюдении далеко расположенных объектов. Дальнейшее развитие технологий получения фотоприемников на этом материале с предельно высокими характеристиками нуждается в детальном изучении электрофизических свойств приборов на его основе.

В данной работе проведено моделирование темного тока p-n перехода на основе CdHgTe. Фотодиод на КРТ с фоточувствительностью в спектральном диапазоне до 10 мкм изготавливается методом ионной имплантации бором и представляет собой  $n^+ - n^-$  структуру. Темновой ток такой структуры обусловлен тремя механизмами: диффузионным, генерационно - рекомбинационным и туннельным. Диффузионный ток представляет собой поток не основных носителей заряда из p-материала в n-материал и рассчитывается по формуле:

$$I_{dif} = \frac{n_i^2}{p} \sqrt{\frac{q \cdot \mu_e \cdot k \cdot T}{\tau_h}} \left( e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (1)$$

Генерационно-рекомбинационный ток обусловлен термической генерацией носителей заряда в ОПЗ. Расчет показывает, что большая часть ОПЗ находится в n-материале. Для этого случая генерационно-рекомбинационный ток рассчитывается по формуле:

$$I_{gr} = \frac{q \cdot n_i}{\tau_{gr}} \int_W^{W-l} e^{\frac{\beta \sqrt{E(x)}}{kT}} dx \cdot \left( e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (2)$$

При больших обратных смещениях ток фотодиода увеличивается экспоненциально, что говорит о включении туннельного механизма переноса тока. Ввиду того, что в реальных устройствах фотодиоды на КРТ работают при малых обратных смещениях, этот механизм не рассматривается.

В результате проведенных расчетов было достигнуто удовлетворительное совпадение расчетной кривой с экспериментальной ВАХ фотодиода в области обратных смещений 0...-150 мВ. При расчете диффузионного тока показано, что в случае сопоставимости длины диффузии в p-материале с размерами p-n перехода, необходимо учитывать эффект увеличения потока заряженных частиц в двумерном случае, по сравнению с одномерным. Поправочный коэффициент, учитывающий этот эффект лежит в пределах от 1.55...1.85. Получены значения подвижности электронов в p-материале, находящиеся в диапазоне 65000 до 80000  $см^2 / (В \cdot с)$ , что согласуется с экспериментом. Время жизни в p-материале составило 4-6 нс, что так же согласуется с экспериментом.

По величине генерационно-рекомбинационного тока получено время жизни в n-материале около 1 мкс, что в 2...6 раз меньше времени жизни в n-типе, что объясняется повышенным уровнем дефектности полупроводника в результате ионного легирования. Если учесть, что время жизни определяется рекомбинацией Шокли-Рида, можно оценить концентрацию глубоких уровней, которая оказалась равной  $N_0 = 5 \cdot 10^{13} см^{-3}$ .