İSSN 0002-3108

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASI
AZERBAIJAN NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES

FİZİKA-RİYAZİYYAT VƏ TEXNİKA ELMLƏRİ SERİYASI
FİZİKA VƏ ASTRONOMİYA

XƏBƏRLƏR
TRANSACTIONS

SERIES OF PHYSICAL-MATHEMATICAL AND TECHNICAL SCIENCES
PHYSICS AND ASTRONOMY

CİLD
VOLUME XXX № 5

<<ELM>> NƏŞRİYYATI <<ELM>>PUBLISHERS

BAKI – 2010 - BAKU

REDAKSİYA HEYYƏTİ

A.Haciyev- baş redaktor, H.Sultanov- baş redaktorun müavini, Ə.Abbasov, C.Allahverdiev, M.Qasımov, Ç.Qaçar, N.Quliyev, M.Əliyev, T.Əliyev, F.Əliyev, İ.İbrahimov, M.Kərimov, A.Mehdiyev, A.Mirzəcanzadə, A.Paşayev, K.Ramazanov, F.Həşimzadə, E.Salayev, M.Şahtaxtinski.

BURAXILIŞIN REDAKSİYA HEYYƏTİ

M.Əliyev-Fizika İnstitutu, baş redaktor, S.Mehdiyeva- Fizika İnstitutu, baş redaktorun müavini, C.Abdinov- Fizika İnstitutu, Ə.Quliyev – Şamaxı Astrofizika Rəsədxanası, H.Əjdərov – Fizika İnstitutu, B.Əsgərov-Bakı Dövlət Universiteti, E.Hüseynov- Fizika İnstitutu, Ş.Naqıyev- Fizika İnstitutu, A.Qəribov- Radiasiya Problemləri İnstitutu, A. Xəlilova- Fizika İnstitutu, məsul katib, İ.Məmmədyarova- Radiasiya Problemləri İnstitutu, baş texniki redaktor.

MÜƏLLİFLƏRİN NƏZƏRİNƏ

"Azərbaycan MEA Xəbərləri" jurnalı fizika və astronomiyanın müxtəlif sahələrinə həsr olunmuş orijinal və qısa məlumatları qəbul edir. Məqalələr bütün dünya tədqiqatçılarından qəbul olunur.

Əlyazmalar azərbaycan, rus və ingilis dillərində qəbul edilir. Hər bir məqalənin əvvəlində məqalə yazilan dildə qısa xülasə çap edilir. Nəşr olunmaq üçün göndərilən məqalələr 210x297mm ölçülü ağ kağızın bir üzündə olmaqla, 1 intervalla lazımi sahə saxlanmasına əməl etməklə (yuxarından – 30mm, soldan - 20mm, aşağıdan – 30mm, sağdan -20mm), mətndəki şrift normal, düzünə 12, sərlövhə - yağlı – 12, müəlliflər – yağlı -12, müəssisə, poçt ünvanları, telefon, faks – yağlı -12; 2 interval buraxmaqla çap edilir. Məqalənin həçmi 8 səhifəni keçməməlidir. Məqalələr 2 nüsxədə və disketdə (şrift-Times New Roman) təqdim olunmalıdır. Çapa qəbul olunmayan məqalələr geri qaytarılmır. Redaksiyaya qöndərilən məqalələr işin yerinə yetirildiyi təşkilatın məktubu ilə müşayət olmalıdırlar.

1. TİTUL SƏHİFƏSİ.

Məqalənin titul səhifəsində 1 sətir intervalla məqalənin adı, müəliflərin soyadı, adı, atasının adı (böyük hərflərlə), tədqiqatçıların iş yeri və müəssisənin ünvanı, məqalə yazilan dildə xülasə çap edilir.

2. ƏDƏBİYYAT.

Ədəbiyyat siyahısı məqalədə qeyd olunan ardıcıllıqla və aşağıdakı qaydada yazılır:

-jurnal məqaləsi üçün: müəlliflərin inisialları və soyadı, jurnalın adı, cild (seriya), nömrə, nəşr ili, səhifə;

-kitab və tezislər ücün: müəlliflərin inisialları və soyadı, kitabın tam adı, nəşr olunan yer və il, fəsil (paraqraf), səhifə.

3. XÜLASƏ.

Xülasə ayri vərəgdə digər 2 dildə çap edilir. Xülasənin həcmi 60-70 sözü keçməməlidir.

4. ŞƏKİLLƏR.

Şəkillər ağ kağızda dəqiq və aydın çəkilməli və ya fotoşəkil təqdim olunmalıdır. Şəkillərin ölçüsü 60x80mm-dən kiçik və 125x160mm-dən böyük olmamalıdır. Şəkilaltı yazılar ayrıca vərəqdə çap olunmalıdır. Şəkilin arxa tərəfində onun nömrəsi və məqalənin adı qöstərilir. Şəkillərdə aydınlaşdırıcı mətn və səkilaltı ifadələr olmamalıdır. Qrafiklərin koordinat oxlarında kifayət qədər az sayda rəqəm olmalı, oxların adı iri və aydın, dəqiq qöstərilməlidir. Əgər qrafikdə bir neçə əyri verilmişsə, onda onları nömrələmək və nömrələrin izahı şəkil altı yazılarda verilməlidir. Bu əyrilərin müxtəlif işarələrlə qöstərilməsinə icazə verilmir. Sİ SİSTEMİNDƏ QÖSTƏRİLƏN VAHİDLƏR İNQİLİS DİLİNDƏ OLMALIDIR. Məqalədə şəkillərin sayi 3-dən çox olmamalıdır.

5. CƏDVƏLLƏR.

Cədvəllər ayrıca vərəqdə təqdim olunur, onlar nömrələnməli və adlandırılmalıdır. Cədvəllərin ölçüləri 125x160mm aşmamalıdır. Məqalədə 3-dən artıq cədvəl olmamalıdır.

6. ÜNVAN.

Məqalələr aşağıdakı ünvana qöndərilir:

Azerbaycan, AZ 1143, Bakı, Hüseyn Cavid prospekti, 33,MEAFİ.
Tel: 439-33-15, E-mail: physics@lan.ab.az

RADIASIYA PROBLEMLƏRİ INSTITUTUNDA ÇAP ÜÇÜN HAZIRLANMIŞDIR
MÜXBİR ÜNVANI: AZERBAYCAN, AZ 1143, BAKI, 555məh., F.AGAEV küç.,9
Tel: 439-33-91; Fax: 438-32-24; E-mail: rad@dcacs.ab.az

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ПОПЕРЕЧНОЕ МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ НИЗКОРАЗМЕРНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЫ ПРИ РАССЕЯНИИ НА ИОНАХ ПРИМЕСИ

Б.М.АСКЕРОВ, Г.И.ГУСЕЙНОВ*, С.Р.ФИГАРОВА

Бакинский Государственный Университет
AZ 1148, Баку, ул. З.Халилова 23
*Азербайджанский Архитектурный и Строительный Университет**
AZ 1073, Баку, ул. А.Султанова 5

В данной работе исследуется поперечное магнитосопротивление в слоистом проводнике с косинусоидальным законом дисперсии электронов проводимости в случае, когда магнитное поле перпендикулярно плоскости слоя при рассеянии носителей тока на ионах примеси. Показано, что существенные изменения в магнитосопротивлении имеют место в сильном магнитном поле, а в слабом они незначительны. Замечено, что магнитосопротивление немонотонно зависит от соотношения между радиусом экранирования и постоянной решетки и при определенном соотношении имеет особенность.

ВВЕДЕНИЕ

Явления переноса в низкоразмерных электронных системах существенно зависят от специфики энергетического спектра и сильно анизотропны. Поэтому исследование явлений переноса может дать ценную информацию о зонной структуре и механизме рассеяния носителей тока в таких системах.

Низкоразмерные системы интересны тем, что в них наблюдаются такие явления как отрицательное дифференциальное сопротивление, анизотропия проводимости, квантовый эффект Холла и другие. Слоистые соединения, в том числе и сверхрешетки, являются идеальной системой для исследования этих явлений и создания различных приборов на их основе: детекторов, высокочувствительных сенсоров, генераторов сверхвысоких частот.

Подвижность в слоях проводников пропорциональна подвижности в массивном образце с той же концентрацией. А движение же носителей тока в направлении перпендикулярном плоскости слоя требует преодоления потенциального барьера. Внешнее магнитное поле перепутывает движения носителей тока вдоль слоев и перпендикулярно к ним, и поэтому кинетические явления будут существенно зависеть от направления магнитного поля. При этом возникает ряд своеобразных эффектов, которые не наблюдаются в обычном трехмерном электронном газе. Среди них ориентационный эффект – зависимость кинетических коэффициентов от направления магнитного поля относительно оси сверхрешетки (см. например [1-3]). В этих работах, на основе кинетического уравнения Больцмана в $\tau-$ приближении теоретически исследуется магнитосопротивление электронного газа с косинусоидальным законом дисперсии. Так, в [1], исследуя зависимость магнитосопротивления от угла между магнитным полем, током и плоскостью слоя, обнаружили осцилляции магнитосопротивления. Известно, что в области низких температур рассеяние носителей тока на ионах примеси является одним из основных механизмов рассеяния. В настоящее время имеется целый ряд работ, посвященных механизмам рассеяния в низкоразмерных системах, и только в некоторых из них (см. например [4]) теоретически исследуются проблемы механизма рассеяния носителей тока на ионах примеси и влияние этого механизма релаксации на кинетические явления.

В данной работе исследуется поперечное магнитосопротивление в слоистом проводнике с косинусоидальным законом дисперсии электронов проводимости в случае, когда магнитное поле перпендикулярно плоскости слоя при рассеянии носителей тока на ионах примеси. Изучено влияние степени заполнения зоны и

соотношения между радиусом экранирования и постоянной решетки в направлении перпендикулярным слоям на величину и знак магнитосопротивления. Показано, что существенные изменения в магнитосопротивлении имеют место в сильном магнитном поле, а в слабом они незначительны.

ОБЩЕЕ ВЫРАЖЕНИЕ КОМПОНЕНТ ГАЛЬВАНОМАГНИТНОГО ТЕНЗОРА

Рассмотрим квазидвумерный электронный газ, в котором зависимость энергии ε от волнового вектора $\boldsymbol{k}$ имеет косинусоидальный вид:

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m_\perp} + \varepsilon_0(1-\cos(ak_z)), \tag{1}$$

здесь $k_\perp{}^2 = k_x{}^2 + k_y{}^2$, $k_\perp$ и k_z - поперечная и продольная компоненты волнового вектора, соответственно, ε_0 - полуширина одномерной мини- зоны проводимости, a - постоянная решетки в направлении, перпендикулярном плоскости слоев, $m_x = m_y = m_\perp$ - эффективная масса электронов проводимости в плоскости слоев, $\hbar$ - постоянная Планка. Этот энергетический спектр реализуется в дихалькогенидах переходных металлов, слоистых полупроводниковых кристаллах, а также в сверхрешетках.

В случае, когда $\varepsilon_0 >> \hbar/\tau$ (где τ - время релаксации), при вычислении магнитосопротивления можно использовать обычное уравнения Больцмана (полуклассический случай) в приближении времени релаксации.

Если ограничиться квазиупругим рассеянием, то общее решение кинетического уравнения в τ - приближении в неквантующем магнитном поле ($\hbar\Omega < k_0 T$) для энергетического спектра (1) будет иметь вид [5]:

$$f(\boldsymbol{k}) = f_0(\boldsymbol{k}) - (\upsilon \boldsymbol{P})\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}, \tag{2}$$

где $\boldsymbol{P}$ - импульс обобщенной силы.

При определении неизвестной векторной функции $\boldsymbol{P}$ будем исходить из кинетического уравнения Больцмана, которое в анизотропном случае в неквантующем магнитном поле $\boldsymbol{B}$ при наличии электрического поля $\boldsymbol{E}$ и температурного градиента ∇T в τ - приближении имеет вид:

$$\boldsymbol{\upsilon}\Phi_0 + \frac{e}{\hbar}[\boldsymbol{\upsilon B}]\nabla_k(\boldsymbol{\upsilon P}) - (\boldsymbol{\upsilon}\,\hat{\tau}^{-1}\boldsymbol{P})) = 0, \tag{3}$$

здесь $\Phi_0 = e\boldsymbol{E} - \frac{\varepsilon-\zeta}{T}\nabla_r T$.

Преобразуя множитель $\nabla_k(\boldsymbol{\upsilon P})$ в (3), для вектора $\boldsymbol{P}$ получим уравнение:

$$-e\left[\boldsymbol{B}\hat{m}^{-1}\boldsymbol{P}\right] + \hat{\tau}^{-1}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{\Phi}_0. \tag{4}$$

Векторное уравнение (4) может быть переписано в компонентах:

$$\sum_\beta \tau_{\alpha\beta}^{-1} P_\beta - \sum_{\beta\chi\zeta} \xi_{\alpha\beta\chi}\Omega_{\chi\zeta}^{\beta} P_\zeta = \Phi_{0\alpha}, \tag{5}$$

где $\xi_{\alpha\beta\chi}$ - единичный антисимметричный тензор третьего ранга Леви-Чивита, а $\Omega_{\chi\zeta}^{\beta} = eB_\beta m_{\chi\zeta}^{-1}$.

Если привести $\hat{m}^{-1}$ и $\hat{\tau}^{-1}$ к главным осям, то (5) упрощается и переходит в систему уравнений:

$$\tau_\alpha^{-1} P_\alpha - \sum_{\beta\chi} \xi_{\alpha\beta\chi}\Omega_\chi^\beta P_\chi = \Phi_{0\alpha}. \tag{6}$$

Следует отметить, что, поскольку законы дисперсии носителей, движущихся

в плоскости слоя и перпендикулярной ему качественно различны (см. формулу (1)), то характер движения носителей тока вдоль направления оси z и перпендикулярно к ней (в плоскости xy) резко различаются и направление магнитного поля существенно влияет на поведение электронной систем.

Рассмотрим частный случай, когда магнитное поле направлено по оси z: $B = B_z$ - магнитное поле направлено перпендикулярно плоскости слоя. Геометрия задача приведена на нижнем Рис. 1.

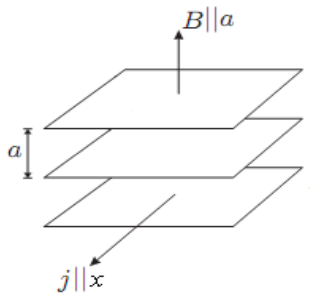


Рис. 1.
Геометрия задачи

Решая систему уравнений (6) при такой геометрии задачи и учитывая, что $m_x = m_y = m_\perp, m_z = m_{II}$, а $\tau_x = \tau_y = \tau_\perp, \tau_z = \tau_{II}$ для компонент обобщенной силы $\boldsymbol{P}$ имеем

$$P_x = \frac{\tau_\perp}{1+\nu_\perp^2}(\Phi_{0x} - \nu_\perp \Phi_{0y}),$$
$$P_y = \frac{\tau_\perp}{1+\nu_\perp^2}(\Phi_{0y} + \nu_\perp \Phi_{0x}), \qquad (7)$$
$$P_z = \tau_{||}\Phi_{0z}.$$

где $\nu_\perp = \Omega_\perp \tau_\perp$, $\Omega_\perp = \dfrac{eB}{m_\perp}$.

Переходя к удобной для данного энергетического спектра цилиндрической системе координат, для плотности тока с учетом (2) получим:

$$j_i = -\frac{em_\perp}{2\pi^2\hbar^2 a}\int_0^{z_0} dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty}\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) P_i \upsilon_i^2 d\varepsilon_\perp, \qquad (8)$$

где $z = ak_z$.

Производя интегрирование по φ в формуле (8), получим следующие выражения для гальваномагнитного тензора:

$$\sigma_{ik} = n_0 e^2 \left\langle \frac{\tau_\perp \nu_\perp^{i-k}}{(1+\nu_\perp^2)} \right\rangle, \qquad (9)$$

здесь $i \le k$, $i,k = x,y$, $n_0 = \dfrac{m_\perp(\zeta - \varepsilon_0)}{\pi\hbar^2 a}$. Знак усреднения $\langle ... \rangle$ имеет смысл

$$\langle A \rangle = \frac{1}{2\pi^2\hbar^2 n_0}\int\left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}\right) A\varepsilon_\perp d\varepsilon_\perp dk_z. \qquad (10)$$

Верхняя граница интегрирования по dk_z определяется степенью заполнения мини-зоны.

При рассеянии электронов проводимости на ионах примеси в квазидвумерных системах при слабой экранировки кулоновского потенциала примесных ионов - $kr_0 >> 1$ для обратного времени релаксации $\tau_\perp$ имеем [6]

$$\frac{1}{\tau_\perp} = \frac{1}{\tau_0}\frac{\ln 4k_z r_0}{(2k_\perp r_0)^3}, \qquad (11)$$

где r_0 - радиус экранирования, $\tau_0 = \dfrac{(m æ)^{1/2}}{8\pi Nea^{3/2}}$, здесь N_i- концентрация примеси, $æ$- диэлектрическая проницаемость кристалла, m и e - масса и заряд электрона,

соответственно. В общем случае радиус экранирования зависит от $z(\zeta_F) = ak_z$, а через уровень Ферми от концентрации и имеет вид:

$$r_0^{-2} = \left(\frac{4\pi e^2}{æ}\right)\frac{m_\perp z(\zeta_F)}{\pi^2\hbar^2 a} = \frac{4\pi e^2 n}{æ\,\varepsilon_0}. \qquad (12)$$

МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ ПРИ РАССЕЯНИИ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА НА ИОНАХ ПРИМЕСИ

Поперечное магнитосопротивление в магнитном поле перпендикулярном плоскости слоя определяется формулой:

$$\frac{\Delta\rho(B)}{\rho} = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)},$$

где $\rho(B)$ равняется

$$\rho(B) = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}{}^2}. \qquad (13)$$

Теперь, подставляя общие выражения компонент тензора электропроводности σ_{ik}, из формулы (9) с учетом (11) в выражении для магнитосопротивления в случае вырожденного электронного газа получим:

$$\frac{\rho(B)}{\rho(0)} = \frac{\displaystyle\int_0^{z_0}\frac{(\cos z - \cos z_0)^{5/2}dz}{\ln\left(\frac{4r_0 z}{a}\right)}\cdot\int_0^{z_0}\frac{(\cos z - \cos z_0)^{5/2}dz}{\left[1+\nu_{\perp 0}^2(\cos z - \cos z_0)^3\right]\ln\left(\frac{4r_0 z}{a}\right)}}{\left[\displaystyle\int_0^{z_0}\frac{(\cos z - \cos z_0)^{5/2}dz}{\left[1+\nu_{\perp 0}^2(\cos z - \cos z_0)^3\right]\ln\left(\frac{4r_0 z}{a}\right)}\right]^2 + \nu_{\perp 0}^2\left[\displaystyle\int_0^{z_0}\frac{(\cos z - \cos z_0)^{4}dz}{\left[1+\nu_{\perp 0}^2(\cos z - \cos z_0)^3\right]\ln\left(\frac{4r_0 z}{a}\right)}\right]^2}, \qquad (14)$$

где $z_0 = \begin{cases} \pi, & если \quad \zeta_F > 2\varepsilon_0, \\ \arccos\left(1 - \dfrac{\varsigma_F}{\varepsilon_0}\right), & если \quad \zeta_F < 2\varepsilon_0. \end{cases}$

Из полученного выражения видно, что удельное сопротивление в слоистых проводниках существенно зависит от соотношения между радиусом экранирования r_0 и постоянной решетки a в направлении перпендикулярно к плоскости слоя, а также от степени заполнении зоны z_0.

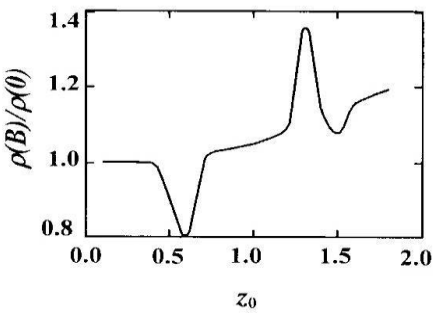


Рис.2.

Зависимость $\frac{\rho(B)}{\rho(0)}$ от степени заполнения зоны Z_0 в сильном магнитном поле при $r_0/a = 5$.

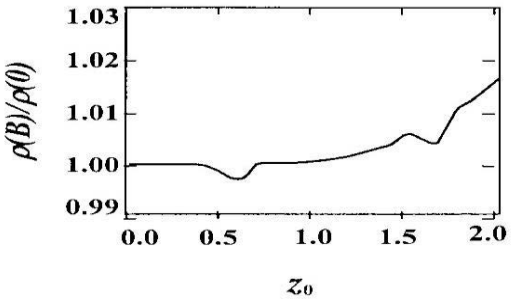


Рис.3.

Зависимость $\frac{\rho(B)}{\rho(0)}$ от степени заполнения зоны z_0 в слабом магнитном поле при $r_0/a = 5$.

На основе формулы (14) была построена зависимость магнитосопротивления от степени заполнения зоны (Рис.2, Рис.3) и отношения радиуса экранирования к постоянной решетки $\frac{r_0}{a}$ (Рис. 4) в случае сильного и слабого магнитного поля.

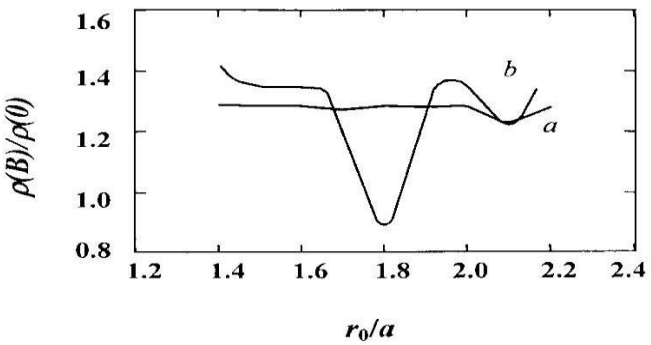


Рис. 4.

Зависимость $\frac{\rho(B)}{\rho(0)}$ от отношения радиуса экранирования к постоянной решетке при $Z_0=\pi$ в слабом магнитном поле *a*, в сильном магнитном поле *b*.

Из приведенных рисунков видно, что в сильном магнитном поле может иметь место отрицательное магнитосопротивление. Кроме того, следует отметить, что магнитосопротивление немонотонно зависит от соотношения между радиусом экранирования и постоянной решетки и при определенном соотношении имеет особенность. Причем радиус экранирования должен быть больше постоянной решетки. Отметим, что существенные изменения в магнитосопротивлении имеют место в сильном поле, в слабом они незначительны. Особенности в поведении магнитосопротивления, по-видимому, связаны с тем, что радиус экранирования является функцией z_0.

1. M.F.Smith, Ross H.McKenzie, *Phys. Rev.,* **B77** (2008) 235123.
2. A.J.Schofield, J.R.Cooper, *Phys.Rev.,* **B62** (2000) 10779.
3. В.Г.Песчанский, *ЖЭТФ*, **112** (1997) 618.
4. Masselink W.Ted., *Phys. Rev. Lett.,* **66** (1991) 1513.
5. B.M.Askerov, *Electron Transport Phenomena in Semiconductors*, *World Scientific, Singapore,* (1993) 412.
6. B.M.Askerov., Г.И.Гусейнов, В.Р. Фигаров, С.Р. Фигарова, *ФТТ*, **50** (2008) 746.

AŞAĞIÖLÇÜLÜ ELEKTRON SİSEMLƏRİ ÜÇÜN AŞQAR İONLARINDAN SƏPİLMƏ HALINDA ENİNƏ MAQNİT MÜQAVİMƏTİ

B.M.ƏSGƏROV, H.İ.HÜSEYNOV, S.R.FİQAROVA

İşdə kosinusoidal dispersiya qanununa malik laylı keçiricilərdə maqnit sahəsi lay səthinə perpendikulyar olduqda aşqar ionlarından səpilmə halında eninə maqnit müqaviməti nəzəri tədqiq olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, zəif maqnit sahəsində maqnit müqavimətinin dəyişməsi zəif olduğu halda, güclü maqnit sahəsində bu dəyişmə hiss olunandır. Qeyd etmək lazımdır ki, maqnit müqaviməti ekranlaşma radiusu ilə qəfəs sabiti nisbətindən qeyri-monoton asılıdır və bu nisbətin müəyyən qiymətlərində məxsusiyyətlərə malikdir.

TRANSVERSE MAGNIRESISTANCE IN A LOW-DIMENSIONAL ELECTRON SYSTEM AT A SCATTERING OF CHARGE CARRIERS BY IMPURITY IONS

B.M.ASKEROV, G.I.GUSEYNOV, S.R.FIGAROVA

The transverse magnetoresistance in a layered conductors on the scattering of charge carriers by impurity ions has been studied in a case, when a magnetic field of perpendicular to the plane of a layer. It has been shown that essential changes in magnetoresistance take place in a strong magnetic field, and in weak they have been insignificant. It has been noted that magnitoresistance the nonmonotonously depends on a relation between radius of screening and a constant lattice and at a certain parity has feature.

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ПОВЕРХНОСТНЫЕ И ОБЪЕМНЫЕ СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ В СЛОЖНЫХ МАГНИТОУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМАХ

М.Н.АБДУЛЛАЕВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33

Теоретически исследованы объемные и поверхностные спиновые возбуждения в сложных (треугольных) Гейзенберговских антиферромагнетиках. При использовании метода функций Грина выбираются те функции, которые состоят из комбинаций сумм и разностей операторов спиновых отклонений подрешеток. В связи с тем, что полюс функции Грина содержит в себе различные комбинации матричных элементов обратной матрицы $e^{i\beta_j}$ $(j=1,...4)$, образующих дисперсионное уравнение, решение имеет сложный вид. Поэтому в настоящей работе рассмотрены два частных случая ($\beta_j=0, \beta_j=\pi.$). При данных значениях углов спектры объемных и поверхностных спиновых волн получаются из биквадратных уравнений, а закон дисперсии отсутствует только для поверхностных спиновых волн при $J^s=J; D^s=D$, где J^s и D^s , J и D параметры поверхностных и объемных обменных и анизотропных полей, соответственно.

В последние годы объектом интенсивных исследований стало изучение поверхностных возбуждений в различных низкоразмерных магнитоупорядоченных ферромагнитных, антиферромагнитных, метамагнитных и ферримагнитных кристаллах $[1-4]$. Такие исследования относятся как к магнитным, так и к немагнитным кристаллам.

Характерной особенностью этих волн возбуждения является их возникновение около поверхности кристалла наряду с возбуждением объемных волн, а их амплитуды экспоненциально уменьшаются с удалением от поверхности кристалла в его глубину. В полубесконечном магнитном кристалле в длинноволновой области доминирующую роль играют диполь-дипольные взаимодействия между магнитными ионами, и такая система описывается уравнениями Максвелла. Для коротковолнового диапазона основную роль играют обменные взаимодействия, а система описывается моделью Гейзенберга. Соответственно в первом случае такие волны называются магнитостатическими, а во втором - поверхностными спиновыми волнами.

Некоторые теоретические исследования [5-8] показывают, что существование поверхности на кристалле повышает магнитную упорядоченность в нем. Это повышение упорядочения, в свою очередь, повышает критическую температуру упорядочения магнитного кристалла. Такие исследования проводились многими авторами в различных полубесконечных ферромагнитных, антиферромагнитных и даже сложных магнитных кристаллах (к примеру в CsCl).

Исследования поверхностных магнитных возбуждений в указанных кристаллах основывались на применении специальных теплицевых (ненулевые элементы, которые располагаются на главной диагонали и диагоналях, соседних с главной) матриц, элементы на главной диагонали которых связаны со спектром системы $[1,2]$. Следовательно в самых простых полубесконечных ферромагнитных кристаллах энергетический спектр системы связан с элементами, находящимся на главной диагонали такой теплицевой (элементы на главной диагонали и соседях с главной диагональн) имеют виды соответственно 2cosβ и -1 или -2cosβ и 1) матрицы, а в полубесконечных двух подрешеточных антиферромагнетиках с матрицей на главной диагонали (в антиферромагнитном случае 2cosβ и -1 заменяется диагональной матрицей, соответственно) системы блочных матриц. Кстати отметим, что в рассматриваемых блочных теплицевых системах каждая двухрядная матрица должна быть диагональной (матрица на главной диагонали с

произвольными элементами, а диагоналях, соседях с главной, единичная). Поэтому для получения специальной теплицевой матрицы для самых простых полубесконечных двухподрешеточных антиферромагнитных кристаллов необходимо диагонализовать каждую матрицу в составе системы блочных матриц. В результате чего получаем блочную двухрядную матрицу теплицевой структуры с диагональными элементами по 2cosβ (матрица на главной диагонали) и на диагоналях, соседих с главной диагональю - по единицам.

В настоящей работе исследовано магнитное возбуждение в сложных треугольных магнитных структурах, расположение спинов которых показано на Рис.1 [9,10]. Наиболее характерной особенностью этих кристаллов является энергетический спектр поверхностных волн, которые возникают в таких кристаллах, не определяющиеся диагональными матричными элементами блочных теплицевых систем. Это связано тем, что матричные столбцы функций Грина в правой и левой сторонах равенства отличаются друг от друга. Такое расположение спинов описывается фрустрированной моделью Гейзенбергских подрешеток не зависимо от того, являются ли они трехмерными или двухмерными [10,11]. Из Рис.1 видно, что отклонения второй и третьей подрешеток относительно первой описываются углами ϑ и φ. В самом деле, уравнения движений для них отличаются друг от друга по $\cos\vartheta$, $\cos\varphi$ и параметрами $\lambda_{\vec{k}} = \sum_{\Delta} e^{i\vec{k}\vec{\Delta}}$ (Δ - расстояние между соседями). При $\vartheta = 120^0, \varphi = 240^0$ и $\vec{k} = (k_x, 0, 0)$ эти уравнения совпадают. Сумма (разность) этих уравнений для первой подрешетки приводит к образованию матричного уравнения в теплицевном виде для трехподрешеточных антиферромагнитных кристаллов. Отметим, что для описания антиферромагнитных кристаллов с помощью такой теплицевой матрицы необходимо диагонализовать каждую матрицу в составе блочной матричной системы. В результате этого уравнение для первой подрешетки вместе с уравнениями для сумм второй и третьей подрешеток образует двухрядную систему (матричная форма), которая получается из трехподрешеточной системы. При этом составленная система уравнений движения для функций Грина образует бесконечные двухрядные матричные системы уравнений. Они решаются с помощью диагонализации матриц на главных диагоналях системы блочной матрицы (на диагональных соседях с главной - единичная), которая составлена из функции Грина. Такие диагонализации матрицы системы осуществляются с помощью матриц преобразования.

Матрицы преобразования получаются из решения уравнений, полученных из равенства нулю недиагональных элементов матрицы, которая была получена путем умножения диагональных элементов матриц блочной матрицы функции Грина на матрицу с неизвестными элементами и на ее обратную матрицу.

ГАМИЛЬТОНИАН СИСТЕМЫ И УРАВНЕНИЯ ДВИЖЕНИЯ

Трехугольный Гейзенбергевский антиферромагнетик описывается Гамильтонианом [11]

$$\mathrm{H}=2J\sum_{l,\Delta_1} S_l S_{l+\Delta_1} + 2J\sum_{l,\Delta_2} S_l S_{l+\Delta_2} + 2J\sum_{l+\Delta_1, l+\Delta_2} S_{l+\Delta_1} S_{l+\Delta_2}\,,$$

$$H_{ani} = -D\left[\sum_{l}\left(S_l^z\right)^2 + \sum_{l+\Delta_1}\left(S_{l+\Delta_1}^z\right)^2 + \sum_{l+\Delta_2}\left(S_{l+\Delta_2}^z\right)^2\right], \tag{1}$$

где J и D-параметры обменного и анизотропного полей для магнитного кристалла, соответственно. Симметрия данной системы описывается группой D_{6h} [10]. Расположение спинов атомов изображено на Рис 1, углы υ и φ- отклонения спинов атомов первой подрешетки от второй и третьей, соответственно. Для того чтобы выразить гамильтониан (1) через операторы спиновых отклонений необходим переход от общей координатной системы к узельной. Используя преобразования Гольдштейна-Примакова можно выразить спиновый гамильтониан через операторы Бозе[11]. По этим операторам введем функции Грина следующего вида

$$G^{11}{}_{i;j}=<<(a_i-a^+);(a_j+a^+)>> \qquad H^{11}{}_{i;j}=(a_i+a^+{}_i);(a_j+a^+{}_j)>>$$

$$G^{22}{}_{i;j}=<<(b_i-b_i^+)+(c_i-c_i^+);(b_j+b_j^+)>> \quad H^{22}{}_{i;j}=<<(b_i+b^+{}_i)+(c_i+c_i^+);(b_j+b^+{}_j)>> \quad (2)$$

$$G^{12}{}_{i;j}=(a_i-a_i^+);(b_j+b_j^+)>> \qquad H^{12}{}_{i;j}=<<(a_i+a^+{}_i);(b_j+b_j)>>$$

$$G^{21}{}_{i;j}=<<(b_i-b_i^+)+(c_i-c_i^+);(a_j+a_j^+)>> \qquad H^{21}{}_{i;j}=<<(b_i+b^+{}_i)+(c_i+c_i^+);(a_j+a^+{}_j)>>$$

и с помощью этого гамильтониана составим для них уравнения движений, где a_i^+,a; b_i^+,b_i и c_i^+,c_i Бозевские операторы спиновых отклонений первой, второй и третьей подрешеток, соответственно.

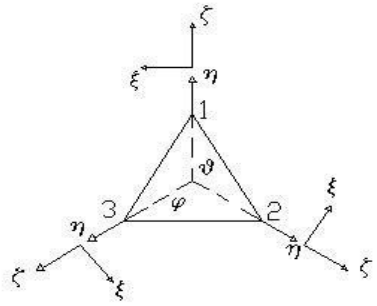


Рис.1.

Положения второй и третьей подрешеток относительно первой, описывающиеся углами ϑ и φ.

Как видно из Рис1, при составлении уравнения движения для операторов из второй и третьей подрешеток они отличаются друг от друга на $\cos\vartheta$, $\cos\varphi$ и $\lambda_k=\sum_{\vec{\Delta}} e^{i\vec{k}\vec{\Delta}}$, но при $\cos 120^0=\cos 240^0=-1/2$ и $\vec{k}=(k_x,0,0)$ (путем простых вычислений имеем $\lambda_{k_x}=1+2\cos(k_x)$) уравнения движения для них совпадают. Поэтому двухрядная матричная форма функции Грина имеет аналогичный вид и в трехмерном случае [11]. Двухрядная матричная форма системы уравнений для них в полубесконечном магнитном кристалле имеет вид

$$\begin{pmatrix} E/2JS & 0 \\ 0 & E/2JS \end{pmatrix}\begin{pmatrix} G^{11}_{1;l'} \\ G^{21}_{1;l'} \end{pmatrix}=\frac{1}{\pi}+\hat{V}_0\begin{pmatrix} H^{11}_{1;l'} \\ H^{21}_{1;l'} \end{pmatrix}+\hat{V}\begin{pmatrix} H^{11}_{1;l'} \\ H^{21}_{1;l'} \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} H^{11}_{2;l'} \\ H^{21}_{2;l'} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E/2JS & 0 \\ 0 & E/2JS \end{pmatrix}\begin{pmatrix} G^{11}_{2;l'} \\ G^{21}_{2;l'} \end{pmatrix}=\hat{V}_0\begin{pmatrix} H^{11}_{2;l'} \\ H^{21}_{2;l'} \end{pmatrix}-\begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1 & 1/2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} H^{11}_{1;l'} \\ H^{21}_{1;l'} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E/2JS & 0 \\ 0 & E/2JS \end{pmatrix}\begin{pmatrix} H^{11}_{1;l'} \\ H^{21}_{1;l'} \end{pmatrix}=\hat{V}_0'\begin{pmatrix} G^{11}_{1;l'} \\ G^{21}_{1;l'} \end{pmatrix}+\hat{V}'\begin{pmatrix} G^{11}_{1;l'} \\ G^{21}_{1;l'} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} G^{11}_{2;l'} \\ G^{21}_{2;l'} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} E/2JS & 0 \\ 0 & E/2JS \end{pmatrix}\begin{pmatrix} H^{11}_{2;l'} \\ H^{21}_{2;l'} \end{pmatrix}=\hat{V}_0'\begin{pmatrix} G^{11}_{2;l'} \\ G^{21}_{2;l'} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} G^{11}_{1;l'} \\ G^{21}_{1;l'} \end{pmatrix}+\begin{pmatrix} G^{11}_{3;l'} \\ G^{21}_{3;l'} \end{pmatrix}$$

Отметим, что системы уравнений представленных в (3) в матричной форме бесконечны. Для упрощения решения этих систем приведем их правые стороны к теплицевым блочным матрицам (левые стороны системы диагональны). Кстати заметим, что рассматриваемая теплицевая матрица состоит из двухрядной блочной матрицы, на главной диагонали которой стоит диагональная матрица с произвольными элементами, а на диагоналях соседей с главной – единичные элементы. Эта процедура осуществляется с помощью матриц преобразования, построение которых основано на выборе двухрядных матриц с неизвестными элементами, с помощью которых действуем на матрицы главной диагонали блочной матрицы функции Грина с правой и левой стороны. Для этого умножим в вначале первую систему на обратную матрицу $\hat{D}_1^{-1}=\begin{pmatrix}-1 & 1\\ 2 & 0\end{pmatrix}$, а вторую - на $\hat{D}_2^{-1}=\begin{pmatrix}-1/2 & 1/2\\ 1 & 0\end{pmatrix}$, соответственно. После умножения получим

$$\hat{D}_1^{-1}\begin{pmatrix}0 & 1/2\\ 1 & 1/2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=\hat{1};\quad \hat{D}_2^{-1}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 2 & 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=\hat{1}$$

$$\hat{D}_1^{-1}\hat{V}_0=\hat{D}_1^{-1}\begin{pmatrix}z+\dfrac{D}{J} & \dfrac{z\lambda_{k_z}}{2}\\ -z\lambda_{k_z} & z-\dfrac{D}{2J}-\dfrac{z\lambda_{k_z}}{2}\end{pmatrix};\quad \hat{D}_2^{-1}\hat{V}_0'=\hat{D}_2^{-1}\begin{pmatrix}z+\dfrac{D}{J} & z\lambda_{k_z}\\ 2z\lambda_{k_z} & z-\dfrac{D}{4J}+z\lambda_{k_z}\end{pmatrix};$$

$$\hat{D}_1^{-1}\hat{V}=\hat{D}_1^{-1}\left\{z\left(\frac{J_s}{J}-1\right)\begin{pmatrix}1 & -\dfrac{\lambda_{k_z}}{2}\\ -\lambda_{k_z} & 1-\dfrac{\lambda_{k_z}}{2}\end{pmatrix}+\frac{D}{J}\left(\frac{D_s}{D}-1\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -\dfrac{1}{2}\end{pmatrix}\right\};$$

$$\hat{D}_2^{-1}\hat{V}'=\hat{D}_2^{-1}\left\{z\left(\frac{J_s}{J}-1\right)\begin{pmatrix}1 & \lambda_{k_z}\\ 2\lambda_{k_z} & 1+\lambda_{k_z}\end{pmatrix}+\frac{D}{J}\left(\frac{D_s}{D}-1\right)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -\dfrac{1}{4}\end{pmatrix}\right\};$$

где $z=3$ число ближайших соседей данного атома.

На основании сказанного дело сводится к выбору двухрядной матрицы с неизвестными элементами, с помощью которой действуем на матрицы $\hat{D}_1^{-1}\hat{V}_0$ и $\hat{D}_2^{-1}\hat{V}_0'$ на главной диагонали блочной матрицы функции Грина в (3) с правой и левой стороны. Из равенства нулю недиагональных элементов этой матрицы получаем два квадратных уравнения относительно отношения $\left(\dfrac{a_{22}}{a_{12}};\dfrac{a_{21}}{a_{11}}\ или\ \dfrac{a_{12}}{a_{22}};\dfrac{a_{11}}{a_{21}}\right)$ неизвестных элементов двухрядной матрицы т.е.

$$(z-\frac{D}{2.J})\,a_{22}^2-(z+\frac{D}{J})a_{22}a_{12}-2(z+\frac{D}{J})a_{12}^2=0 \tag{4}$$

$$2(z+\frac{D}{J})a_{11}^2+(z+\frac{D}{J})a_{11}a_{21}-(z-\frac{D}{2J})a_{21}^2=0.$$

Аналогичным путем получим два квадратных уравнения относительно отношения других неизвестных элементов двухрядной матрицы $\left(\dfrac{b_{22}}{b_{12}};\dfrac{b_{21}}{b_{11}}\ или\ \dfrac{b_{12}}{b_{22}};\dfrac{b_{11}}{b_{21}}\right)$ т.е.

$$\left(z-\frac{D}{4J}\right)b_{22}^2-\left(z+\frac{D}{J}\right)b_{22}b_{12}-2\left(z-\frac{D}{J}\right)b_{12}^2=0 \qquad (4')$$

$$2\left(z+\frac{D}{J}\right)b_{11}{}^2+\left(z-\frac{D}{J}\right)b_{11}b_{21}-\left(z-\frac{D}{J}\right)b^2{}_{21}=0$$

Из решения этих уравнений построим матрицы преобразования для каждой матрицы на главной диагонали системы блочных матриц. На основании вышесказанного дело сводится к решению этих квадратных уравнений. В результате этого решения имеем

$$\hat{U}_L=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & a_{22}\end{pmatrix}=L\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2L}}\sqrt{\sqrt{1+\frac{8}{L}}+1} & \frac{1}{\sqrt{2L}}\sqrt{\sqrt{1+\frac{8}{L}}-1} \\ -\sqrt{\sqrt{1+\frac{8}{L}}-1} & \sqrt{\sqrt{1+\frac{8}{L}}+1}\end{pmatrix}, \qquad (5)$$

$$\hat{U}_M=\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ -b_{21} & b_{22}\end{pmatrix}=M\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2M}}\sqrt{\sqrt{1+\frac{8}{M}}+1} & \frac{1}{\sqrt{2M}}\sqrt{\sqrt{1+\frac{8}{M}}-1} \\ -\sqrt{\sqrt{1+\frac{8}{M}}-1} & \sqrt{\sqrt{1+\frac{8}{M}}+1}\end{pmatrix}.$$

Для того чтобы с помощью матриц преобразований $\hat{U}_L$ и $\hat{U}_M$ диагонализовать матрицы $\hat{D}_1^{-1}\hat{V}_0$ и $\widehat{D}_2^{-1}\widehat{V}_0{}'$ в (3), необходимо чтобы элементы неизвестных матриц удовлетворяли следующим условиям $\frac{a_{11}}{a_{22}}=-\frac{a_{12}}{a_{21}}=\sqrt{\frac{1}{L}}$, $\frac{b_{11}}{b_{22}}=-\frac{b_{12}}{b_{21}}=\sqrt{\frac{1}{M}}$. Иными словами, без этих условий детерминант неизвестных матриц равен нулю. В работе [1] эти отношения выполняются для единицы. С помощью этих матриц преобразования можно диагонализовать матрицы на главной диагонали блочных систем функции Грина следующим образом

$$\hat{U}_L^{-1}\hat{D}_1^{-1}\hat{V}_0\hat{U}_L=\begin{pmatrix} z\lambda_{k_z}+\frac{z+\frac{D}{J}}{2}\left(1+\sqrt{1+\frac{8}{L}}\right) & 0 \\ 0 & z\lambda_{k_z}+\frac{z+\frac{D}{J}}{2}\left(1-\sqrt{1+\frac{8}{L}}\right)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 2\cos\beta_1 & 0 \\ 0 & 2\cos\beta_2\end{pmatrix}, \qquad (6)$$

$$\hat{U}_M^{-1}\hat{D}_2^{-1}\hat{V}_0'\hat{U}_M=\begin{pmatrix} z\lambda_{k_z}-\frac{z+\frac{D}{J}}{2}\left(1+\sqrt{1+\frac{8}{M}}\right) & 0 \\ 0 & z\lambda_{k_z}-\frac{z+\frac{D}{J}}{2}\left(1-\sqrt{1+\frac{8}{M}}\right)\end{pmatrix}=-\begin{pmatrix} 2\cos\beta_3 & 0 \\ 0 & 2\cos\beta_4\end{pmatrix}$$

где $L=\dfrac{z+\frac{D}{J}}{z-\frac{D}{2J}}$; $\quad M=\dfrac{z+\frac{D}{J}}{z-\frac{D}{4J}}$;

Таким образом, для того чтобы бесконечную систему блочных матриц функций Грина, приведенных в правой стороне (3), привести к теплицевому виду, необходимо привести к диагональному виду по $2\cos\beta_j$ (j =1,…4) их матрицы на главной диагонали, а на диагоналях, соседних с главной, к единичной матрице.

Отметим, что обозначения матриц приведенных выше через диагональные матрицы по $2\cos\beta$ или по $2\mathrm{ch}\,\beta$ зависят от значения матричных элементов, так что если они меньше единицы, получается матрица, на главной диагонали которой находятся элементы по $2\cos\beta$ и, наоборот, если больше единицы, то матрица на главной диагонали равна $2\mathrm{ch}\,\beta$. При этом матричные элементы обратных матриц определяются элементами $f^{\beta}{}_{mn}$.

СПЕКТР ПОВЕРХНОСТНЫХ ВОЛН

Спектр элементарных возбуждений полубесконечных трехподрешеточных антиферромагнитных кристаллов определяется полюсом функции Грина в (3),

$$\det\left\{\begin{pmatrix} \hat{f}^{-1}\hat{D}_1^{-1}\begin{pmatrix} E/2JS & 0 \\ 0 & E/2JS \end{pmatrix} & -\left(1+\hat{f}^{-1}\hat{D}_1^{-1}\hat{V}\right) \\ -\left(1-\hat{f}^{-1}\hat{D}_2^{-1}\hat{V}'\right) & \hat{f}^{-1}\hat{D}_2^{-1}\begin{pmatrix} E/2JS & 0 \\ 0 & E/2JS \end{pmatrix} \end{pmatrix}\right\}=0, \tag{7}$$

здесь диагональные элементы матрицы (7) описываются левой, а недиагональные элементы правой стороной системы уравнений (3). $\hat{f}$ и $\hat{f}^{-1}$ соответственно матрицы приведенные в правой стороне (3) систем матриц уравнений в блочном виде и обратные ее элементы, которые определяются следующим образом

$$f_{nm}^{\beta_j}=\frac{1}{2i\sin\beta_j}\left(e^{i(n-m)\beta_j}-e^{i|n-m|\beta_j}\right). \tag{8}$$

Отметим, что нижний индекс у $2\cos\beta_j$ (j=1,2,3,4) пробегает по диагональным элементам матриц на главной диагонали систем блочных матриц в (6) и, используя их выражения в (6) и (8), уравнение (7) для спиновых поверхностных волн можно представить в более ясном виде

$$\left\{\begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix}-\begin{vmatrix} e^{i\beta_1}\left(\frac{1}{2}e^{i\beta_3}+e^{i\beta_4}\right) & -\frac{1}{2}e^{i\beta_1}e^{i\beta_3} \\ -e^{i\beta_2}e^{i\beta_3} & e^{i\beta_2}e^{i\beta_3} \end{vmatrix}\left(\frac{E}{2JS}\right)^2-\right.$$

$$-\begin{vmatrix} e^{i\beta_1}\left(3+\lambda_{k_x}\right)+\frac{1}{2}e^{i\beta_3}\left(\lambda_{k_x}-\frac{3}{2}\right) & -e^{i\beta_1}\left(1+\lambda_{k_x}\right)-\frac{1}{2}e^{i\beta_3}\left(\lambda_{k_x}-\frac{1}{2}\right) \\ -2e^{i\beta_2}\left(1+\lambda_{k_x}\right)-e^{i\beta_4}\left(\lambda_{k_x}-\frac{1}{2}\right) & 2\left(e^{i\beta_2}-\frac{1}{4}e^{i\beta_4}\right) \end{vmatrix} z\left(\frac{J_s}{J}-1\right)-, \tag{9}$$

$$\left.\begin{vmatrix} 3\left(e^{i\beta_2}-\frac{1}{4}e^{i\beta_3}\right) & \frac{1}{2}\left(e^{i\beta_2}-\frac{1}{8}e^{i\beta_3}\right) \\ -2\left(e^{i\beta_2}+\frac{1}{4}e^{i\beta_4}\right) & -\left(e^{i\beta_2}+\frac{1}{8}e^{i\beta_4}\right) \end{vmatrix}\frac{D}{J}\left(\frac{J_s}{J}-1\right)\right\}=0$$

где $e^{i\beta_1}+e^{-i\beta_1}=z\lambda_{k_z}+\dfrac{z+\frac{D}{J}}{2}\left(1+\sqrt{1+\frac{8}{L}}\right)$

Из последнего выражения видно, что энергетический спектр системы не содержи $2\cos\beta_1$.

Для получения остальных выражений $\cos\beta_j\ (j=2,3,4)$ поступаем совершенно аналогично тому, как было сделано в случае первой строки матрицы в (6). Сравнение этих формул с обычными формулами поверхностных спиновых волн показывает, что в данном случае теплицевые матрицы противоположны обычным

и не содержат параметра энергетического спектра системы. Как показано в введении, это связано с функцией Грина в рассматриваемых кристаллах.

Поскольку уравнение (7) является уравнением четвертой степени относительно спектра системы и содержит различные комбинации параметров $e^{i\beta_j}$, то его решение в аналитическом виде приводит к громоздкому выражению. Поэтому необходимо найти его решения в частных случаях: a)J^5=J, D^5 =D; b) $J^5 \neq J$, D^5=D; c) J^5=J, $D^5 \neq D$. Уравнение (7) позволяет по возмущению, вносимому в магнитный кристалл его поверхностью, найти энергетический спектр полубесконечного магнитного кристалла. Наиболее важной особенностью этого уравнения является наличие у него в явном виде как матриц содержащих возмущения, так и не содержащих их. Это связано с тем, что при получении выражения (7) из выражения (3) мы не принимали в расчет параметры выше первого порядка по возмущению.

При $J^s = J$ и $D^S = D$ из уравнения (7) получается дисперсионное уравнение для идеального кристалла, решения которого определяют границу энергетических спектров между объемными и поверхностными волнами

$$\left\{ \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} e^{i\beta_1}\left(\frac{1}{2}e^{i\beta_3} + e^{i\beta_4}\right) & -\frac{1}{2}e^{i\beta_1}e^{i\beta_3} \\ -e^{i\beta_2}e^{i\beta_3} & e^{i\beta_2}e^{i\beta_3} \end{vmatrix} \left(\frac{E}{2JS}\right)^2 \right\} = 0 . \qquad (10)$$

В связи с тем, что уравнение (7) содержит в себе различные комбинации $e^{i\beta_j}$, решение его для определения энергетического спектра имеет сложный вид. Поэтому для графической иллюстрации дисперсионного закона системы, описанной уравнением (7), в настоящей работе рассматриваются упрощенные случаи ($\beta_j = 0$, $\beta_j = \pi$, j = 1,..4) (Рис.2, Рис.3, Рис.4).

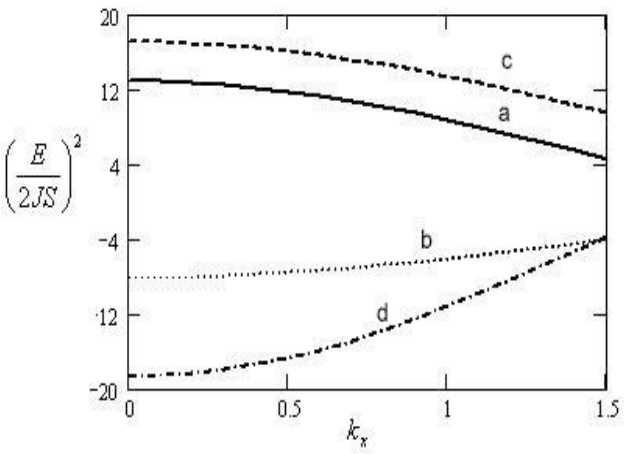


Рис. 2.

Дисперсия спиновых волн, связаная с возмущением обменных интегралов. В случае $(J_S/J) = 1.5$ a-первый корень, b-второй корень; $(J_S/J) = 0.1$. c-первый корень, d- второй корень, $D_s = D$, $\beta = 0$.

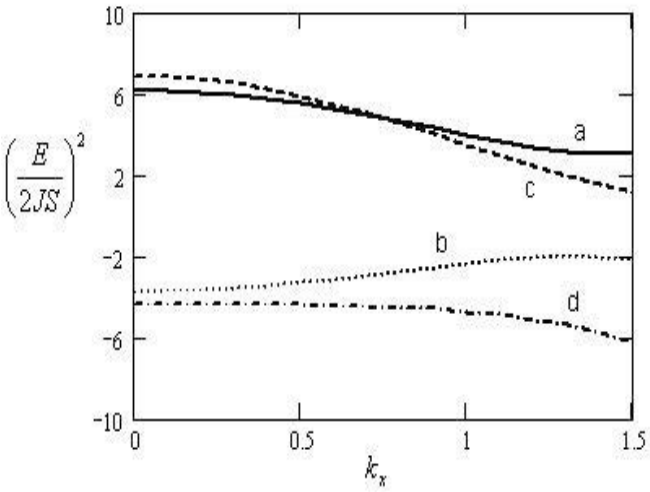


Рис.3.

Графики дисперсии для случая $\beta = \pi$. Параметры возмущения выбраны в прежнем виде: $(J_S/J) = 0.8$; 0.1, $D_s = D$.

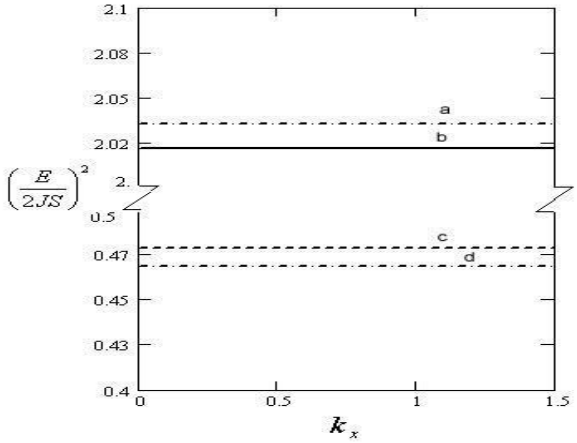


Рис.4.

Дисперсия спиновых волн, связанная с анизотропией. (При этом частотная зависимость дается отдельной линией. Поскольку величина возмущения очень мала эти линии не отличаются друг от друга в случаях $\beta = 0$ и $\beta = \pi$; области, в которых они различаются друг от друга: $J_s = J$; $(D_S/D) = 0.008$; 0.1).

1. R.E.De Wamts and T.Wolfram, Phys.Rev.,**185** (1969) 720.
2. T.Wolfram and R.E.De Wames, Phys Rev.**185 (**1969) 762.
3. J.H.Baskay and M.G.Cottam, Phys.Rev., **B42** (1990) 4304.
4. Song-Tao Dai and Zhen-Ya Li, Phys. Let., **146** (1990) 450.
5. R.Richter, J.G.Gay and J.R.Smith, Phys.Rev.Lett., **54** (1985) 54.
6. R.H.Victora and L.M. Falicov, Phys.Rev.,**B31** (1985) 7335.
7. G.Allan, Phys. Rev., **B19** (1979) 4774.
8. G.Allan, Surf. Rep., **1** (1981) 121.
9. T.Suzuki and Natsume, J,Phys.Soc.Jap., **56** (1987) 1577.
10. М.Н.Абдуллаев, ФНТ, **27** (2001) 865.
11. А.К.Муртазаев,И.К.Камилов, М.К.Рамазанов, ФНТ, **32** (2006) 323.

MÜRƏKKƏB MAQNİTNİZAMLI KRİSTALLARDA SƏTH VƏ HƏCM SPİN DALĞALARI

M.N.ABDULLYEV

Heyzenberq tipli mürəkkəb (üçbucaq şəkilli) antiferromaqnitlərdə səth və həcm spin dalğaları nəzəri baxımdan tədqiq edilmişdi. Holşteyin-Primakov yaxınlaşmasına əsaslanan. Qrin funksiyası metodu əsasında enerji spektri ücün ifadə alınmışdır. Bu ifadədə baş dioqonal elementləri səth parametrləri ilə əlaqəli olan üç diaqonallı yarım-sonsuz matris özünü brüzə verir. Həmin matrisin tərsinin elementləri səth spin dalğaları üçün dispersiya qanununa ğətirir. İfadə mürəkkəb olduğundan tərs matris elementlərinin ($e^{i\beta}$) iki qiymətinə baxılmışdır($\beta = 0;\ \beta = \pi.$).

EXCITATIONS OF THE SURFACE AND BULK SPIN WAVES IN THE ORDINARY MAQNETIC (TRIANQULAR) CRYSTALS

M.N.ABDULLAYEV

The bulk and surface spin waves have been investigated theoretically in triangular Heisenberg antiferromagnetic. Using Green function method those function have been chosen that consist of combinations of the sums and differences of spin deviation operators of the second and the third sublattices. In connection with that the poles of Green function comprises various combinations of matrix elements of matrixes $e^{i\beta_j}$ (j=1,…4) the its solution has had a complex form. Therefore in the present work two special carse have been considered ($\beta_j = 0; \beta_j = \pi$). At the given angel values the spectra of volumetric and surface spin waves have been obtained bequadratic equations, and the law of the dispersion did not exist only for surface spin waves at $J^s = J; D^s \neq D$; Cohere J^s and D^s; J and D have been parameters of surface and bulk exchange and anisotropic fields accordingly.

Редактор: Б.Тагиев

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ELLIPSOMETRIC STUDY OF LATTICE-MISMATCH INDUCED ELASTOOPTIC EFFECT IN ZnS/GaAs- and $CuGaS_2$/GaP- THIN FILM/ SUBSTRATE SYSTEMS

X.N.XALILOVA, D.I.HUSEYNOVA, S.V.HAMIDOV, V.N.CAFAROVA, Z.A.JAHANGIRLI, G.S.ORUDZHEV, N.T.MAMEDOV

Institute of Physics of Azerbaijan National Academy of Sciences
AZ 1143, Baku, H.Javid ave. 33

This work is aimed at ellipsometric determination of photo-elastic and piezooptic constants of new materials and reports the result of calculations of the effect of lattice-mismatch optical indicatrix of the stressed film, and solution of direct ellipsometric task for stressed film/substrate system.

INTRODUCTION

In recent two decades ellipsometric approach has gained a worldwide recognition as the most correct approach for description of light wave. Applications of are nowadays very numerous and are spread out from *in-sity* control in planar technologies to precise determination of optical function of solids. Ellipsometry is well known as one of the powerful methods to control thin film and surface parameters [1-7]. A huge variety of problems which are or could be solved by ellipsometric study is very persuative and has provoked our present trial to explore a possibility of ellipsometric investigation of the photo-elastic effect which should take place in thin film/substrate systems because of lattice mismatch.

This work is aimed at ellipsometric determination of photo-elastic and piezooptic constants of new materials and reports the result of calculations of the effect of lattice-mismatch optical indicatrix of the stressed film, and solution of direct ellipsometric task for stressed film/substrate system. Also, some experimental data obtained with spectroellipsometer Jobin-Ivon for available ZnS/GaAs and $CuGaS_2$/GaP systems is given for comparison.

CONDITION FOR FILM THICKNESS

The only film which can meet the condition of being called an elastically stressed film due to lattice mismatch is dislocation free film. Formation of dislocation will lead to either a plastic deformation of the film or to a film in which stress is a secondary effect due to dislocation. In the former case no reason for photo-elastic effect is present because the film will simply change its shape keeping unstressed. The latter case is no longer a stressed film/substrate system, and need separate consideration. To avoid formation of dislocation in the interface between film and substrate the thickness of the film must not exceed a certain critical value h_c which can be easily obtained from energetic consideration as

$$h<h_c=b/f \qquad (1)$$

here b is the Burgers vector of the generated dislocation and f is the fractional difference in lattice parameter between film and substrate. From the data on dislocations in ZnS and $CuGaS_2$, and lattice mismatch values the critical thickness of the film in ZnS/GaAs and $CuGaS_2$/GaP systems can be estimated by A and A, correspondingly. It is appropriate to mention here that the further obtained results are also applicable to the films thicker than h_c if they are dislocation free. The critical thickness implies only that if the film thickness is lesser than critical one, the film is hundred percent dislocations free.

Another condition which limits the film thickness is an ununiform deformation of the film. For the worst case the stress in the interface will exponentially go down with thickness of the film. Suppose, the deformation r is uniform whithin the elementary cell

size a. The deformation at any z point can then be written as $r(z) = r_0 e^{-\frac{z}{a}}$,and an effective deformation across the film is

$$r_{eff}(d_{film}) = \frac{1}{d_{film}} \int_0^{d_{film}} r_0 e^{-\frac{z}{a}} dz = r_0 \frac{a}{d_{film}} \left(1 - e^{-\frac{d_{film}}{a}} \right), \quad (2)$$

here $r_0 = \frac{a_{sub} - a_{film}}{a_{film}}$ is the deformation due to lattice mismatch in the interface. Taking into account that the magnitude of the elastooptic effect should exceed 10^{-4} (accuracy of modern ellipsometers), the thickness of the film should not exceed 50A for elastooptic effect to be observable.

Together with elastooptic effect, in stressed film it is necessary to take into account the change of film thickness due to stress in the interface. The effect of the change of the thickness of the film is to be taken into account as well. And the change of the ellipsometric angles will present the total effect. It is easy to show that the change of the e-parameter of the film due to the stress in the interface can be written as $c^s_{film}=c_{film}-$

$$2\frac{c_{film}}{a_{film}} v(x,z)(a_{sub} - a_{film}) \text{ or } d^s_{film}=d_{film}-2v(x,z)d_{film}r_0=d_{film}\left[1 - 2v(x,z)r_0\right], \quad (3)$$

here v(x,z) is the Puasson coefficient. For cubic ZnS and ZnSe it is easy to show that

$$v(x,z)\frac{S_{1133}}{S_{1111}} = -\frac{S_{12}}{S_{11}} = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \ . \quad (4)$$

Following the point symmetry of $CuCaS_2$ we have

$$v(x,z)=-\frac{S_{3311}}{S_{1111}} = -\frac{S_{13}}{S_{11}} = \frac{C_{13}(C_{11} - C_{12})}{C_{11}C_{33} - C_{13}^2},$$

C_{ij} - are the elastic coefficients. Taking into account Eq. (2),

$$d^{eff}_{film} = d_{film} - 2v(x,z)d_{film}r_0 \frac{a_{film}}{d^{eff}_{film}} \left(1 - e^{-\frac{d^{eff}_{film}}{a_{film}}} \right) = d_{film}\left(1 - 2v(x,z)\frac{(a_{sub} - a_{film})}{d^{eff}_{film}}\right)\left(1 - e^{-\frac{d_{film}}{a_{film}}}\right) \approx$$

$$\approx d_{film}\left[1 - 2v(x,z)\frac{(a_{sub} - a_{film})}{d^{eff}_{film}}\right]. \quad (5)$$

Solution of Eq. (5) on d^{eff}_{film} gives

$$d^{eff}_{film} = \frac{d_{film}}{2} + \frac{\sqrt{d^2_{film} - 8v(x,z)d_{film}(a_{sub} - a_{film})}}{2}. \quad (6)$$

FOTOELASTIC EFFECT IN STRESSED FILM

The photoelastic effect due to stress (t) or deformation (r) which corresponds to this stress is written as

$$\Delta\eta_{ij}=\pi_{ijkl}t_{kl}=p_{ijkl}r_{kl}\ , \text{ in tensor form, } \Delta\eta_m=\pi_{mn}t_n=p_{mn}r_n \quad (7)$$

in matrix form, where $\pi_{mn}=\pi_{ijkl}$, n=1,2,3 ; $\pi_{mn}=2\pi_{ijkl}$, n=4,5,6 and $=p_{ijkl}$, n=1,2,3; $p_{mn}=2p_{ijkl}$, n=4,5,6. Here Δ is the change of the polarization constant η_m due to stress or deformation, π_{mn} and p_{mn} are the piezooptic and photoelastic coefficients, correspondingly; t_n and r_n are the stress and deformation, correspondingly.

To write down the equation (2) of the fotoelastic effect in the stressed film it is necessary to know symmetries of the film and substrate, as well as their orientation. For

the sake of certainity let us consider ZnS ($\bar{4}3m$) /GaAs($\bar{4}3m$) [8] and $CuGaS_2$($\bar{4}2m$) /GaAs($\bar{4}3m$) [9] systems with interface surface perpendicular to [001] direction (z-direction) in both cases.

ZnS/GaAs SYSTEM

Before stress, in a coordinate system where z is directed perpendicular to the interface and x and y axes lie in the plane of interface, the equation for polarization constants in the film can be written as

$$\eta\,(x^2+y^2+z^2)=1. \tag{8}$$

After stress t due to lattice mismatch is applied along x and y directions we have

$$\begin{bmatrix} & t & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta\eta_1 & \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta\eta_2 & \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{12} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta\eta_3 & \pi_{12} & \pi_{12} & \pi_{11} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta\eta_4 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ \Delta\eta_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ \Delta\eta_6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} \end{bmatrix} \tag{9}$$

and the equation (3) can be rewritten as

$$[\eta+(\pi_{11}+\pi_{12})t]x^2+[\eta+(\pi_{12}+\pi_{11})t]y^2+[\eta+(2\pi_{12})t]z^2=1. \tag{10}$$

Taking into account the relationship for r_0 and that $\eta=1/N^2$ (N is the refractive index) and supposing everywhere that $\Delta\eta<<\eta$, for optical indicatrix we have

$$\frac{x^2+y^2}{N^2\left(1-N^2\frac{(p_{11}+p_{12})r}{2}\right)^2}+\frac{z^2}{N^2\left(1-N^2p_{12}r\right)^2}=1 \tag{11}$$

i.e., initially optically isotropic film turned into optically uniaxial film with optical axis C along the normal to the interface and refractive indexes for ordinary and extraordinary beam

$$N_0 = N\left(1-N^2\frac{(p_{11}+p_{12})r}{2}\right) \quad (12) \quad \text{and} \quad N_e = N\left(1-N^2p_{12}r\right) \quad (12^*),$$

respectively.

$CuGaS_2$/GaP SYSTEM

CuGaSe film is a uniaxial film, and the equation for polarization constants before stress can be written as $\eta_o(x^2+y^2)+\eta_e z^2=1$.

After stress t due to lattice mismatch along x and y is applied, we have

$$\begin{bmatrix} & t & t & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \Delta\eta_1 & \pi_{11} & \pi_{12} & \pi_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta\eta_2 & \pi_{12} & \pi_{11} & \pi_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta\eta_3 & \pi_{31} & \pi_{31} & \pi_{33} & 0 & 0 & 0 \\ \Delta\eta_4 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 & 0 \\ \Delta\eta_5 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{44} & 0 \\ \Delta\eta_6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \pi_{66} \end{bmatrix} \tag{13}$$

and the equation (5) can be rewritten as,

$$[\eta_o+(\pi_{11}+\pi_{12})t]x^2+[\eta_o+(\pi_{11}+\pi_{12})t]y^2+[\eta_e+(2\pi_{31})t]z^2=1$$

and for optical indicatrix we have

$$\frac{x^2+y^2}{N_0^2\left(1-N_0^2\frac{(p_{11}+p_{12})r}{2}\right)^2}+\frac{z^2}{N_e^2\left(1-N_e^2p_{31}r\right)^2}=1 \tag{14}$$

i.e the film is again a uniaxial film with the same orientation of the principal axes but the new refractive indexes for ordinary and extraordinary beam,

$$N_0^{new}=N_0\left(1-N_0^2\frac{(p_{11}+p_{12})r}{2}\right) \text{ and } N_e^{new}=N_e\left(1-N_e^2p_{31}r\right). \tag{15}$$

ELLIPSOMETRIC APPROACH FOR ZnS/GaAs AND $CuGaS_2$/GaP SYSTEMS

In anizotropic systems we have the most general relationship between p- and s-components of the complex amplitude of the reflected (r) and incident (i) waves [10]

$$E_p^r=R_{pp}E_p^i+R_{sp}E_s^i \;,\quad E_s^r=R_{sp}E_p^i+R_{ss}E_s^i. \tag{16}$$

To change to ellipsometric language let us divide Eq. (12) to Eq.(12*)

$$\frac{E_p^r}{E_s^r}=\frac{\left(\frac{R_{pp}}{R_{ss}}\right)\frac{E_p^i}{E_s^i}+\left(\frac{R_{ps}}{R_{ss}}\right)}{\left(\frac{R_{sp}}{R_{ss}}\right)\frac{E_p^i}{E_s^i}+1}, \tag{17}$$

where Rpp/Rss, Rps/Rss and Rsp/Rss are the relative coefficients of reflection , which we have to determine by solving Wave Equation [10] $\Delta E-\text{graddiv}E+(2\pi/\lambda)^2D=0$. It follows from section 3 (see 3.1 and 3.2) that we have to conside an isotropic substrate and a uniaxial film on, with the same z axis for the film and film/substrate system. It follows from Eq. (9) that in this case the x- and y- components of the electrical vector obey the following equations:

$$\varepsilon_e\frac{\partial^2E_x}{\partial z^2}+\varepsilon_0\left[\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\varepsilon_e-k_x^2\right]E_x=0, \text{ and } \frac{\partial^2E_y}{\partial z^2}+\left[\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\varepsilon_0-k_x^2\right]E_y=0, \tag{18}$$

where, k_x=const=$(2\pi/\lambda)\sin\varphi$, and $\varepsilon_o=(n_o-ik_o)^2$ and $\varepsilon_e=(n_e-ik_e)^2$ are the complex diagonal components of dielectric function tensor. Now let us consider s-component of the incident wave. In this case Ey=Es;Ex=Ez=0; Hy=0. Using the Abbeles method, from solutions of the Eq.(14) the following matrix of tangential components of electric and magnetic field can be constructed:

$$M_s(0,d)=\begin{pmatrix} m_{s11}m_{s12}\\ m_{s21}m_{s22}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}\left[e^{-i\delta_0}+e^{-i\delta_0}\right] & \frac{1}{2g_0}\left[e^{-i\delta_0}-e^{i\delta_0}\right]\\ \frac{g_0}{2}\left[e^{-i\delta_0}-e^{-i\delta_0}\right] & \frac{1}{2}\left[e^{-i\delta_0}+e^{i\delta_0}\right]\end{pmatrix}, \tag{19}$$

where $\delta_0=\frac{2\pi}{\lambda}d\sqrt{\varepsilon_0-\sin^2\varphi}$ and $g_0=\sqrt{\varepsilon_0-\sin^2\varphi}$.

Now tangential components in the interfaces between film and ambient and film and substrate can be connected through matrix

\

$$Q_s(0)=\begin{pmatrix}E_s(0)\\ H_x(0)\end{pmatrix}=M_s(0,d)\begin{pmatrix}E_s(d)\\ H_x(d)\end{pmatrix}. \tag{20}$$

Hereafter let us distinguish between thick and thin substrate. In the thick or absorptive substrate we have no waves reflected from the interface between substrate and ambient and this case, as ti will be seen afterwards, corresponds the situation in

ZnS/GaAs system. In the thin substrate, we have waves reflected from its bottom boundary and this will modify the total reflected field. (This case will correspond the experimental situation in $CuGaS_2$/GaP system).

THICK SUBSTRATE

$$R_{ss} = \frac{-(m_{s21} + gm_{s22}) + g_{sub}(m_{s11} + gm_{s12})}{(m_{s21} - gm_{s22}) - g_{sub}(m_{s11} - gm_{s12})} e^{-2ik_z d} \ , \tag{21}$$

Where

$$g = \cos\varphi, \text{and}\ g_{sub} = \sqrt{\varepsilon_{sub} - \sin^2\varphi}\ . \tag{22}$$

THIN SUBSTRATE

In this case Rss will be given by the relation (16)

$$M_s(0, d_{sub} + d) = \begin{pmatrix} m_{s11} & m_{s12} \\ m_{s21} & m_{s22} \end{pmatrix} = M(d_{sub}, d) M(0, d_{sub}), \tag{23}$$

here $M(d_{sub},d)$ is the same as matrix (15), matrix $(0, d_{sub})$ has the form similar with matrix (15) in which δ_0 and g_0 must be replaced by δ_{sub} and g_{sub}, respectively,i

$$M_S(0, d_{sub}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\left[e^{-i\delta_{sub}} + e^{i\delta_{sub}}\right] & \frac{1}{2g_{sub}}\left[e^{-i\delta_{sub}} - e^{i\delta_{sub}}\right] \\ \frac{g_{sub}}{2}\left[e^{-i\delta_{sub}} - e^{i\delta_{sub}}\right] & \frac{1}{2}\left[e^{-i\delta_{sub}} + e^{i\delta_{sub}}\right] \end{pmatrix}, \tag{24}$$

where $\delta_{sub} = \frac{2\pi}{\lambda} d_{sub}\sqrt{\varepsilon_{sub} - \sin^2\varphi}$ and $g_{sub} = \sqrt{\varepsilon_{sub} - \sin^2\varphi}$.

Similary to R_{ss} it is easy to show that R_{pp} can be written as Thick substrate

$$R_{ss} = \frac{-(m_{p21} - gm_{p22}) - \frac{g_{sub}}{\varepsilon_{sub}}(m_{p11} - gm_{p12})}{(m_{p21} + gm_{p22}) + \frac{g_{sub}}{\varepsilon_{sub}}(m_{p11} + gm_{p12})} e^{-2ik_z d} \tag{25}$$

where,

$$M_p(0, d) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\left[e^{-i\delta_e} + e^{i\delta_e}\right] & -\frac{\varepsilon_e}{2g_e}\left[e^{-i\delta_e} - e^{i\delta_e}\right] \\ -\frac{g_e}{2\varepsilon_e}\left[e^{-i\delta_e} - e^{i\delta_e}\right] & \frac{1}{2}\left[e^{-i\delta_e} + e^{i\delta_e}\right] \end{pmatrix} \tag{26}$$

$$\delta_e = \frac{2\pi}{\lambda} d\sqrt{\varepsilon_0 - \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_e}\right)\sin^2\varphi} \quad \text{and} \quad g_e = \sqrt{\varepsilon_e - \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_e}\right)\sin^2\varphi}\ . \tag{27}$$

THIN SUBSTRATE

In this case $M_p(d_{sub},d)$ is equal,

$$M_p(0, d_{sub}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\left[e^{-i\delta_{sub}} + e^{i\delta_{sub}}\right] & -\frac{\varepsilon_{sub}}{2g_{sub}}\left[e^{-i\delta_{sub}} - e^{i\delta_{sub}}\right] \\ -\frac{g_{sub}}{2\varepsilon_{sub}}\left[e^{-i\delta_{sub}} - e^{i\delta_{sub}}\right] & \frac{1}{2}\left[e^{-i\delta_{sub}} + e^{i\delta_{sub}}\right] \end{pmatrix} \tag{28}$$

The ratio of $g_{sub}/\varepsilon_{sub}$ must be replaced by $g=\cos\varphi$. The coefficients m can be obtained from

$$M_p(0, d_{sub} + d) = \begin{pmatrix} m_{p11} & m_{p12} \\ m_{p21} & m_{p22} \end{pmatrix} = M_p(d_{sub}, d) M_p(0, d_{sub}). \tag{29}$$

DIRECT ELLIPSOMETRY TASK FOR ZnS/GaAs, ZnSe/GaAs AND $CuGaS_2$/GaP

Direct ellipsometry task implies a computation of ellipsometric angles ψ and Δ of the system under consideration using analytic expressions obtained in Section 4. Our main target is the photoelastic effect in stressed film/substrate system. To calculate the magnitude of the effect in ψ-and Δ-units we will go the following way. First, we will calculate ψ and Δ for unstressed film/substrate systems at different thickness of the film d. After that we will calculate ψ and Δ for stressed film/substrate system at the same values of the thickness of the film and different magnitude ($p_{mn}r$, r is known) of the photoelastic effect. For both cases we will constract Δ=f(ψ) dependies and will estimate the smallest value of the photoelastic effect, which we are still able to register.

UNSTRESSED ZnS/GaAs SYSTEM

ZnS/GaAs system presents an isotropic film/substrate system for which the principal equation of the ellipsometry ($\tan\psi e^{i\Delta}=R_p/R_s$) is very well known is given by

$$\tan\psi \times e^{i\Delta} = \frac{r_{01p} + e^{-2\delta_2} e^{-2i\delta_1} r_{12p}}{1 + e^{-2\delta_2} e^{-2i\delta_1} r_{01p} r_{12p}} \times \frac{1 + e^{-2\delta_2} e^{-2i\delta_1} r_{01s} r_{12s}}{r_{01s} + e^{-2\delta_2} e^{-2i\delta_1} r_{12s}} , \qquad (30)$$

$$r_{12p} = \frac{\sqrt{\varepsilon_{sub} - \frac{\varepsilon_{sub}\sin^2\varphi}{\varepsilon_{film}}} - \sqrt{\varepsilon_{film} - \frac{\varepsilon_{film}\sin^2\varphi}{\varepsilon_{sub}}}}{\sqrt{\varepsilon_{sub} - \frac{\varepsilon_{sub}\sin^2\varphi}{\varepsilon_{film}}} + \sqrt{\varepsilon_{film} - \frac{\varepsilon_{film}\sin^2\varphi}{\varepsilon_{sub}}}} \qquad r_{12s} = \frac{\sqrt{\varepsilon_{film} - \sin^2\varphi} - \sqrt{\varepsilon_{sub} - \sin^2\varphi}}{\sqrt{\varepsilon_{film} - \sin^2\varphi} + \sqrt{\varepsilon_{sub} - \sin^2\varphi}}$$

$$r_{01s} = \frac{\cos\varphi - \sqrt{\varepsilon_{film} - \sin^2\varphi}}{\cos\varphi + \sqrt{\varepsilon_{film} - \sin^2\varphi}} , \qquad \delta_1 = \frac{\sqrt{2}\pi}{\lambda} \times d \times \sqrt{\sqrt{a^2 + b^2} + a} , \ \delta_2 = \frac{\sqrt{2}\pi}{\lambda} \times d \times \sqrt{\sqrt{a^2 + b^2} - a}$$

$$a = n_{film}^2 - k_{film}^2 - \sin^2\varphi , \quad \varepsilon_{film} = n_{film}^2 - k_{film}^2 - i2n_{film}k_{film}, \ \varepsilon_{sub} = n_{sub}k_{sub}^2 - i2n_{sub}k_{sub} .$$

Let us select the experimental wavelength in region where sensitivity of spectroellipsometr Jobin-Ivon is high and the substrate is absortive enough to avoid formation of the reflected beam from the bottom boundary of the substrate.

UNSTRESSED $CuGaS_2$/GaP SYSTEM

$CuGaS_2$/GaP before stress in anisotropic system and, depending on the substrate (thick or thin), the principal equation of the ellipsometry should be written with R_p and R_s coefficients taken from either sections 4.1 and 4.1 or sections 4.2 and 4.2. There exists a possibility to simplify the problem by selecting the experimental wavelength at λ=6400 ^{0}A where $N_0=N_e$ (isotropic point) and uniaxial optical idicatrix (7) turns into sphere. It is easy to show that in this case,

$$\tan\psi \times e^{i\Delta} = \frac{r_{01p} + e^{-2\delta_2^{film}} e^{-2i\delta_1^{film}} r_{12p} + e^{-2\delta_2^{sub}} e^{-2i\delta_1^{sub}} r_{01p} r_{12p} r_{23p} + e^{-2(\delta_2^{film} + \delta_2^{sub})} e^{-2i(\delta_1^{film} + \delta_1^{sub})} r_{23p}}{1 + e^{-2\delta_2^{film}} e^{-2i\delta_1^{film}} r_{01p} r_{12p} + e^{-2\delta_2^{sub}} e^{-2i\delta_1^{sub}} r_{12p} r_{23p} + e^{-2(\delta_2^{film} + \delta_2^{sub})} e^{-2i(\delta_1^{film} + \delta_1^{sub})} r_{01p} r_{23p}} \times \qquad (31)$$

$$\times \frac{1 + e^{-2\delta_2^{film}} e^{-2i\delta_1^{film}} r_{01s} r_{12s} + e^{-2\delta_2^{sub}} e^{-2i\delta_1^{sub}} r_{12s} r_{23s} + e^{-2(\delta_2^{film}+\delta_2^{sub})} e^{-2i(\delta_1^{film}+\delta_1^{sub})} r_{01s} r_{23s}}{r_{01s} + e^{-2\delta_2^{film}} e^{-2i\delta_1^{film}} r_{12s} + e^{-2\delta_2^{sub}} e^{-2i\delta_1^{sub}} r_{01s} r_{12s} r_{23s} + e^{-2(\delta_2^{film}+\delta_2^{sub})} e^{-2i(\delta_1^{film}+\delta_1^{sub})} r_{23s}}$$

The other coefficients are given by

$$r_{23p} = \sqrt{1 - \frac{\sin^2\varphi}{\varepsilon_{sub}}} - \sqrt{\varepsilon_{sub}}\cos\varphi \Big/ \sqrt{1 - \frac{\sin^2\varphi}{\varepsilon_{sub}}} + \sqrt{\varepsilon_{sub}}\cos\varphi , \qquad r_{23s} = \frac{\sqrt{\varepsilon_{sub} - \sin^2\varphi} - \cos\varphi}{\sqrt{\varepsilon_{sub} - \sin^2\varphi} + \cos\varphi}$$

$$\delta_2^{film(sub)} = \frac{\sqrt{2}\pi}{\lambda} \times d_{film(sub)} \times \sqrt{\sqrt{a_{film(sub)}^2 + b_{film(sub)}^2} - a}\,, \delta_1^{film(sub)} = \frac{\sqrt{2}\pi}{\lambda} \times d_{film(sub)} \times \sqrt{\sqrt{a_{film(sub)}^2 + b_{film(sub)}^2} + a}\,,$$

$$a_{film(sub)} = n_{film(sub)}^2 - k_{film(sub)}^2 - \sin^2\varphi, \qquad b_{film(sub)} = 2n_{film(sub)} k_{film(sub)}.$$

SELECTION OF EXPERIMENTAL ANGLE OF INCIDENCE

The change of polarization angles due to the change of the dielectric constant of the film is observable if the following conditions is fulfilled

$$\delta\psi_{\min} = \delta\varepsilon_{film,\min}^{(\psi)} \left(\frac{\partial\psi}{\partial\varepsilon_{film}} \right) - \delta\psi_{el} > 0 \quad \text{and} \quad \delta\Delta_{\min} = \delta\varepsilon_{film,\min}^{(\Delta)} \left(\frac{\partial\Delta}{\partial\varepsilon_{film}} \right) - \delta\Delta_{el} > 0\,, \qquad (32)$$

where $\delta_{film\min}^{(\psi,\Delta)}$ are the minimal value of the change of the dielectric constant of the film, $\partial\psi / \partial\varepsilon_{film}$ and $\partial\Delta / \partial\varepsilon_{film}$ are the first derivatives, $\delta\psi_{el}$ and $\delta\Delta_{el}$ are the threshold sensitivities of the employed ellipsometer. To find the angle φ (Fig. 1) of the maximal sensitivity, we have to find the second derivatives $\frac{\partial^2\psi}{\partial\varepsilon_{film}\partial\varphi}$ and $\frac{\partial^2\Delta}{\partial\varepsilon_{film}\partial\varphi}$.

ZnS/GaAs and ZnSe/GaAs AFTER STRESS

It follows from Sections 2.2, 4.1 and 4.1 that after stress the principal ellipsometry equation can be rewritten as

$$\tan\psi e^{i\Delta} = \frac{\left(\cos\varphi - \frac{g_{sub}}{\varepsilon_{sub}}\right)\cos\delta_e + i\left(\frac{g_{sub}}{\varepsilon_{sub}}\frac{\varepsilon_e}{g_e} - \frac{g_e}{\varepsilon_e}\right)\sin\delta_e}{\left(\cos\varphi + \frac{g_{sub}}{\varepsilon_{sub}}\right)\cos\delta_e + i\left(\frac{g_{sub}}{\varepsilon_{sub}}\frac{\varepsilon_e}{g_e} + \frac{g_e}{\varepsilon_e}\right)\sin\delta_e} \times \frac{(\cos\varphi + g_{sub})\cos\delta_0 + i\left(g_0 + \frac{g_{sub}}{g_0}\right)\sin\delta_0}{(\cos\varphi - g_{sub})\cos\delta_0 + i\left(g_0 - \frac{g_{sub}}{g_0}\right)\sin\delta_0}, \qquad (33)$$

here

$$\delta_e = \frac{2\pi}{\lambda} d_{eff} \sqrt{\varepsilon_0 - \left(\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_e}\right)\sin^2\varphi}\,, \qquad \delta_0 = \frac{2\pi}{\lambda} d_{eff} \sqrt{\varepsilon_0 - \sin^2\varphi} \qquad (34)$$

and

$$\varepsilon_e = n_{film}^2 (1 - n_{film}^2 p_{12} r_{eff})^2 \quad , \quad \varepsilon_0 = n_{film}^2 (1 - n_{film}^2 \frac{p_{11} + p_{12}}{2} r_{eff})^2. \qquad (35)$$

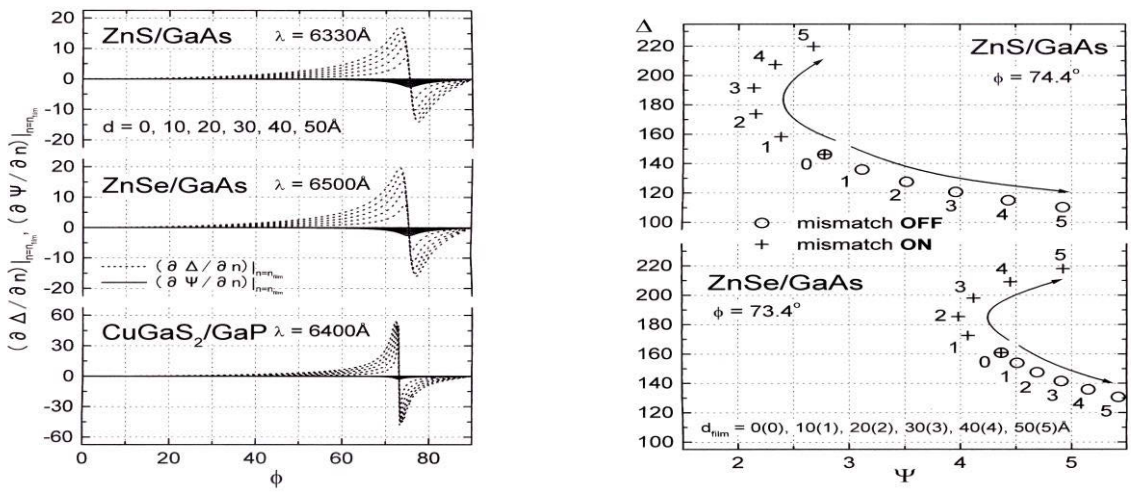


Fig. 1.
Angle φ of the maximal sensitivity.

1. R.M.A.Azzam, N.M.J.Bashara, *Opt. Soc. Amer.,* **63** (1973) 508.
2. R.M.A.Azzam, N.M.J.Bashara, *Opt. Soc. Amer.*, **63** (1973) 1331.
3. A.M.Kostruba, *Optics and Laser Technology*, **41** (1) (2009) 5.

4. S.Y.Hsun., T.L.Gaik, L.W.Hao, C.S.Hui, Y.H.Chia, H.M.Hsiung, *Applied spectroscopy,* **61** (2007) 1007.
5. A.M.Kostruba, *Optics and Laser Technology,* **41** (2009) 5.
6. H.C.Yuan, L. Z.You, C.Y.Faye, *Applied optics*, **48** (2009) 3139.
7. D.Datta, V.Tripathi, P.Gogoi, S.Banerjee, S.Kumar, *Thin Solid Films*, **516** (2008) 7237.
8. N.Mamedov, K.Wakita, Y.Shim, K.Abe, N.Ogushi, *Thin Solid Films*, **517** (2008) 1434.
9. S.Iida, H.Icinokura, Y.Toyama, A.Kato, *Journal of Physics and Chemistry of Solids,* **64** (2007) 2017.
10. А.В.Ржанов, К.К.Свиташев, А.И.Семененко, В.К.Соколов, *Основы эллипсометрии, Наука,* (1979).

ZnS/GaAs və $CuGaS_2$/GaP –NAZIK TƏBƏQƏ/ALTLIQ SISTEMLƏRINDƏ QƏFƏS TƏHRIF OLUNMA ILƏ YARANMIŞ ELASTOOPTIK EFFEKTIN ELLIPSOMETRIK ÖYRƏNILMƏSI

X.N.XƏLILOVA, D.İ.HÜSEYNOVA, S.V.HƏMIDOV, V.N.CƏFƏROVA, Z.A.CAHANGIRLI, H.S.ORUCOV, N.T.MƏMMƏDOV

Verilmiş məqalədə bəzi maddələrin fotoelastik və piyezooptik sabitlərinin ellipsometrik təyini tədqiq olunmuşdur. Qəfəs sabitlərinin uyğunsuzluğu nəticəsində yaranan deformasiyanın optik indikatrisə təsiri müəyyənləşdirilmiş və təbəqə/altlıq sistemi üçün birbaşa ellipsometrik məsələ həll edilmişdir.

ЭЛЛИПСОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛАСТООПТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА ВЫЗВАННОГО РЕШЕТОЧНЫМ НЕСООТВЕТСТВИЕМ В СИСТЕМАХ ZnS/GaAs и $CuGaS_2$/GaP ТОНКИЙ СЛОЙ/ПОДЛОЖКА

Х.Н.ХАЛИЛОВА, Д.И.ГУСЕЙНОВА, С.В.ГАМИДОВ, В.Н.ДЖАФАРОВА, З.А.ДЖАХАНГИРЛИ, Г.С.ОРУДЖЕВ, Н.Т.МАМЕДОВ

В данной работе рассмотрено эллипсометрическое определение фотовольтаических и пьезооптических констант некоторых материалов. Приведены результаты расчета влияния решеточного несоответствия на оптическую индикатрису деформированного слоя и решения прямой эллипсометрической задачи для систем слой/подложка.

Редактор: Э.Гусейнов

РАСЧЕТ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ СОЕДИНЕНИЙ GeSe МЕТОДОМ ЛКАО И ИССЛЕДОВАНИЕ ГЛУБОКИХ УРОВНЕЙ АНТИСТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ Ge_{Se} И Se_{Ge}

З.А.ДЖАХАНГИРЛИ, Г.С.ОРУДЖЕВ*

Азербайджанский технический университет
AZ 1143, г.Баку, пр. Г. Джавида, 25
*Институт Физики НАН Азербайджана**
AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33

С помощью метода линейных комбинаций атомных орбиталей (ЛКАО) выполнено теоретическое исследование электронной структуры полупроводникового соединения GeSe, а также расчет глубоких уровней антиструктурных дефектов Ge_{Se} и Se_{Ge}. Блоховская сумма конструировалась из Слетеровских орбиталей s-, p- и d-симметрии.

ВВЕДЕНИЕ

Определение электронной структуры точечных дефектов, таких как вакансия, примеси, антиструктурные дефекты и т.д., является основной задачей экспериментальной и теоретической физики полупроводников [1,2]. В этом смысле слоистые полупроводниковые соединения орторомбической сингонии A^4B^6 с пространственной группой симметрией D_{2h}^{16} [3], обладающие сильной структурной анизотропией, являются прекрасным объектом для исследования.

В настоящей работе методом ЛКАО исследована зонная структура полупроводникового соединения GeSe, и с использованием полученных волновых функций методом функции Грина [4,5] самосогласованным образом рассчитаны глубокие уровни антиструктурных дефектов Ge_{Se} и Se_{Ge}.

Параметры элементарной ячейки GeSe: a=3,82Å, в=10,79Å, и c=4,38Å. Координаты атомов внутри элементарной ячейки (в долях параметров элементарной ячейки) задаются следующим образом

$$\pm(1/4,\ y\ ,\ z)\ ;\quad \pm(1/4,\ 1/2+y\ ,\ 1/2-z),$$

где верхний знак соответствует атомам катиона, а нижний – атомам аниона. Позиционные параметры атомов: y_{Ge}=0.879, z_{Ge}=0.106, y_{Se}=0.148, z_{Se}=0.503 [3].

МЕТОД РАСЧЕТА ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ

В данной работе Блоховская сумма, сконструированная из слетеровских орбиталей $\varphi_m(\vec{r})$, определяется как

$$\psi^{(j)}{}_m(\vec{k},\vec{r}) = \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\vec{R}}\ \varphi_m(\vec{r}-\vec{R}-\vec{\tau}_j)\,, \tag{1}$$

где $\vec{R}$ - трансляционные векторы решетки, $\vec{\tau}_j$ - базисные векторы атомов.

Интегралы перекрытия и матричные элементы Гамильтониана определены разложением блоховских функций на плоские волны

$$\psi_m(\vec{k},\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} \alpha_m(\vec{k}+\vec{G}) e^{i(\vec{k}+\vec{G}).\vec{r}}\ . \tag{2}$$

Коэффициенты разложения $\alpha_m(\vec{k}+\vec{G})$ можно представить в виде

$$\alpha_m(\vec{k}+\vec{G}) = \Omega^{-1}\int e^{-i(\vec{k}+\vec{G}).(\vec{r}+\vec{\tau}_j)}\varphi_m(\vec{r})d\vec{r} \tag{3}$$

где Ω -объем примитивной ячейки.

Тогда для интегралов перекрытия можно получить в виде

$$S_{mn}(\vec{k}) = \langle\psi_m(\vec{k},\vec{r})\,|\psi_n(\vec{k},\vec{r})\rangle, \tag{4}$$

или, $$S_{mn}(\vec{k}) = \sum_{\vec{G}} \alpha_m^*(\vec{k}+\vec{G})\alpha_m(\vec{k}+\vec{G}).$$

Матричные элементы Гамильтониана

$$H_{mn}(\vec{k}) = \sum_{\vec{G}\vec{G}'} \alpha_m^*(\vec{k}+\vec{G})\alpha_m(\vec{k}+\vec{G}')[(\hbar^2/2m)\delta_{\vec{G}\vec{G}'} + V(\vec{G}-\vec{G}')], \quad (5)$$

где $V(\vec{G}-\vec{G}')$ – фурье-образ кристаллического потенциала.

Для расчета интегралов перекрытия S_{mn} и матричных элементов Гамильтониана H_{mn}, были использованы Слетеровские орбитали, центрированные в шести ближайших соседних атомах. В этом случае все матричные элементы получаются в аналитическом виде, и вычислительный процесс существенно упрощается. Известно, что когда все интегралы перекрытия атомных волновых функций, а также суммы по кристаллической решетке для вычисления матричных элементов проводятся с большой точностью, метод сильной связи дает реальные результаты [6].

В наших расчетах были использованы Слетеровские орбитали типа

$$\varphi(\vec{r}) = r^n e^{-\alpha r} Y_{lm}(\theta,\phi) \quad (6)$$

и десять базисных функций s-, p- и d- типа. Для s-, p- типа

$$\varphi_s(\vec{r}) = re^{-\alpha_1 r}, \quad (7)$$

$$\varphi_x(\vec{r}) = xre^{-\alpha_2 r} \quad \text{и т.д.}, \quad (8)$$

а для пяти блоховских функций d- типа

$$\varphi_{xy}(\vec{r}) = xye^{-\alpha_2 r} \quad \text{и т.д.} \quad (9)$$

$$\varphi_{(x^2-y^2)}(\vec{r}) = (x^2-y^2)re^{-\alpha_2 r} \quad \text{и т.д.} \quad (10)$$

$$\alpha = (2\pi/a)\lambda. \quad (11)$$

Для того чтобы проверить точность расчетов зонной структуры методом ЛКАО, были проведены расчеты зонной структуры более точным методом псевдопотенциала на базисе плоских волн с теми же псевдопотенциалами. Нелокальные псевдопотенциалы из первых принципов конструировались по схеме, предложенной Г.Б.Бачелет и др. [7]. Обменно-корреляционные потенциалы вычислялись по схеме Сеперли и Алдер, параметризованной Пердю и Цунгером.

Сначала были проведены расчеты с использованием базисов s-, p- типа. Расчеты методом сильной связи на базисе ЛКАО и методом псевдопотенциала на базисе плоских волн дают идентичные результаты для валентных зон, а их зоны проводимости проявляют малое различие. Это различие в зоне проводимости объясняется тем, что разложение волновых функций зоны проводимости на s-, p-базисе является неполным. Добавление более локализованных базисов d-типа улучшает результаты расчетов и сводит расхождения к минимуму.

Сходимость результатов была проверена с добавлением базисов атомных орбиталей, центрированных на следующих ближайших соседях, и выявлено, что учет новых базисов мало влияет на энергию валентной зоны и зоны проводимости.

Энергетическая зонная структура GeSe, расчитанная методом ЛКАО с использованием базисов s-, p- и d-типа, λ_{Ge} , λ_{Se}=1.5 для s-, 1.8 для p-, d типа и точным методом псевдопотенциала на базисе плоских волн, показаны на Рис.1. Интересно отметить, что метод сильной связи даже с таким ограниченным количеством базисных функций способен водить к реалистичным результатам.

Как видно из Рис.1, валентная зона селенида германия состоит из трех групп зон. Характерное попарное расположение валентных зон является следствием слоистости кристалла. Анализ волновых функций валентных состояний показывает, что самая нижняя группа, отдаленная от основной группы валентной зоны широким энергетическим зазором около 6эВ, происходит из s-состояний аниона.

Следующая группа, состоящая из четырех зон и расположенная около -8эВ, связана с s-состояниями Ge. Самая верхняя группа из двенадцати зон, расположенных в области от 0 до -6эВ, обязаны своим происхождением p-состояниям катиона и аниона. Анализ происхождения валентных состояний хорошо согласуется с данными фотоэлектронной эмиссии [8].

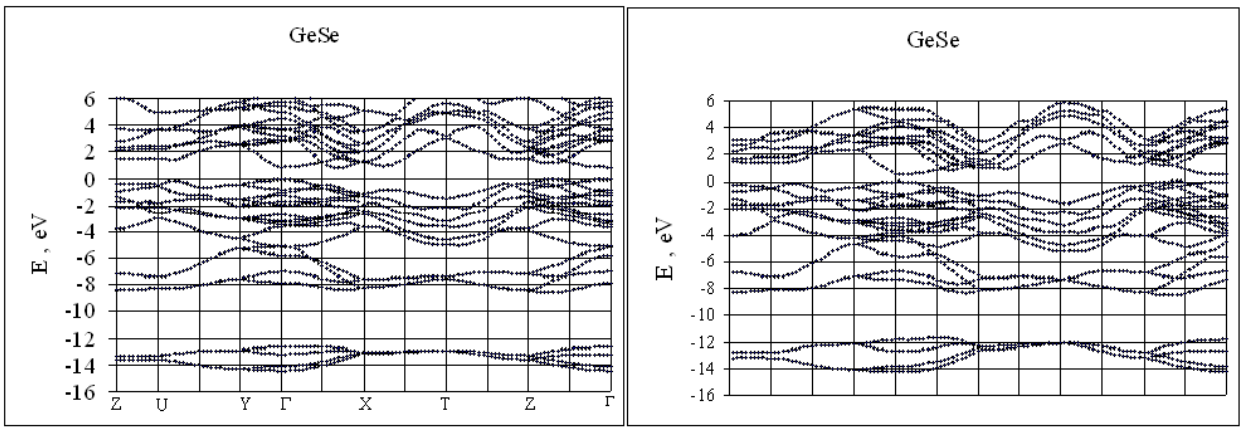


Рис.1.

Зонная структура GeSe, расчитанная методом псевдопотенциала (левый рис.) и методом сильной связи (правый рис.).

Несмотря на малость чисел базисных функций, использованных в методе сильной связи, получено хорошее согласие результатов сильной связи с результатами расчета, основанного на плоских волнах. Известно, что метод эмпирической сильной связи хорошо описывает только валентную зону. В отличие от эмпирической сильной связи в наших расчетах и зона проводимости находится в хорошем согласии с предыдущими точными расчетами.

МЕТОД ФУНКЦИИ ГРИНА

Допустим, что H является одночастичным гамильтонианом данной многоатомной системы. Определим оператор Грина следующим образом

$$G(E) = \lim_{\varepsilon \to 0^+} (E + i\varepsilon - H)^{-1}, \tag{12}$$

где лимит $\varepsilon \to 0^+$ необходим только в том случае, если E - собственные значения H, то есть $(E\text{-}H)^{-1}$ является сингулярной. В результате, дискретные собственные значения определяются полюсами G(E) - нулями детерминанта $G^{-1}(E)$.

Оператор плотности заряда ρ(E) и плотности состояний N(E) определяются как (2,3,4)

$$\rho(E) = -\frac{2}{\pi} \operatorname{Im} G(E), \qquad N(E) = Tr\rho(E) \tag{13}$$

или,

$$N(E) = -\frac{2}{\pi} Tr \operatorname{Im} G(E).$$

Изменение плотности состояний, индуцированных дефектом, равно

$$\Delta N(E) = \frac{2}{\pi} \frac{d\delta(E)}{dE}, \tag{14}$$

где $$\delta(E) = -\tan^{-1}[\operatorname{Im} D(E) / \operatorname{Re} D(E)].$$

При наличии дефекта в кристалле оператор Гамильтона H можно написать в виде

$$H = H^0 + U\,, \tag{15}$$

где H^0- гамильтониан идеального кристалла, U- возмущение, внесенное дефектом.

Тогда оператор Грина G - возмущенной и G^0- невозмущенной системы будут связаны друг с другом уравнением Дайсона

$$G(E) = G^0(E) + G^0(E)UG(E)\,. \tag{16}$$

Далее находим

$$G(E) = [1 - G^0(E)U]^{-1} G^0(E)\,. \tag{17}$$

Тогда дефектные уровни в запрещенной зоне будут соответствовать энергиям, где

$$D(E) = \det \| 1 - G^0(E)U \| \tag{18}$$

равняется нулю. Для каждого состояния волновая функция находится из уравнения

$$[1 - G^0(E)U]\psi = 0\,. \tag{19}$$

Для того чтобы провести расчеты, операторы $G^0(E)$ и U должны быть представлены в матричной форме

$$G^0(E) = \lim_{\varepsilon \to 0^+} \sum_{n,\vec{k}} \frac{| n,\vec{k} >< n,\vec{k} |}{E + i\varepsilon - E_{n,\vec{k}}}\,. \tag{20}$$

Разложим ψ по ортонормированным базисам φ_α

$$\psi = \sum_\alpha C_\alpha \varphi_\alpha \tag{21}$$

и выразим матричные элементы $G^0(E)$ и U в тех же базисах

$$G^0_{\alpha\alpha'}(E) = \sum_{n,\vec{k}} \frac{< \alpha \mid n,\vec{k} >< n,\vec{k} \mid \alpha' >}{E - E^0_{n\vec{k}}}\,, \tag{22}$$

где $E^0_{n\vec{k}}$ - собственные значения H^0, то есть идеального кристалла. Тогда (19) становится линейным алгебраическим уравнением

$$\sum_{\alpha'} [\delta_{\alpha\alpha'} - \sum_{\alpha''} G^0_{\alpha\alpha'}(E) U_{\alpha''\alpha'}] C_\alpha = 0\,, \tag{23}$$

которое имеет ненулевые решения только в том случае, если

$$\det \| \delta_{\alpha\alpha'} - \sum_{\alpha''} G^0_{\alpha\alpha'}(E) U_{\alpha''\alpha'} \| = 0\,. \tag{24}$$

Если функции φ_α локализованы в атомных центрах и потенциал возмущения U сильно локализован, то матричный элемент $U_{\alpha''\alpha'}$ будет отличен от нуля только для некоторых ближайших соседей.

Теоретико-групповой анализ показывает, что как точечная группа C_{1h} Ge_{Se}, так и Se_{Ge} антиструктурных дефектов состоит из элементов: {E}-единичный элемент, $\{\sigma_v\}$-плоскость отражения, перпендикулярная к оси x и проходящая через дефекты (оси выбраны как в [3]). Оба представления одномерные и все дефектные состояния невырождены. Согласно точечной симметрии дефектные состояния или симметричны или антисимметричны относительно плоскости отражения. На Рис.2. приведены потенциалы антиструктурных Ge_{Se} и Se_{Ge} дефектов в GeSe.

С учетом вышесказанного был проведен расчет энергетического спектра электронов для кристаллов GeSe с антиструктурными дефектами Ge_{Se} и Se_{Ge} . Для обоих дефектов в запрещенную зону GeSe попадает один локализованный уровень. Так как дефектный потенциал Se_{Ge} носит отталкивающий характер по отношению к электрону, локализованный уровень выталкивается из валентной зоны и находится в фундаментальной запрещенной зоне при E_v+0,12эВ. Дефектный потенциал Ge_{Se} носит притягивающий характер к электрону, и, как следствие,

локализованный уровень отщеплен от зоны проводимости и расположен в верхней части запрещенной зоны при E_c-0,16эВ. Оба состояния в фундаментальной запрещенной зоне являются пустыми. Волновые функции обоих локализованных состояний в запрещенной зоне, в основном, состоят из p-типа орбиталей. Это согласуется с фактом, что верхняя группа валентной зоны и нижняя группа зоны проводимости GeSe, в основном, состоят из p-типа состояний катиона и аниона.

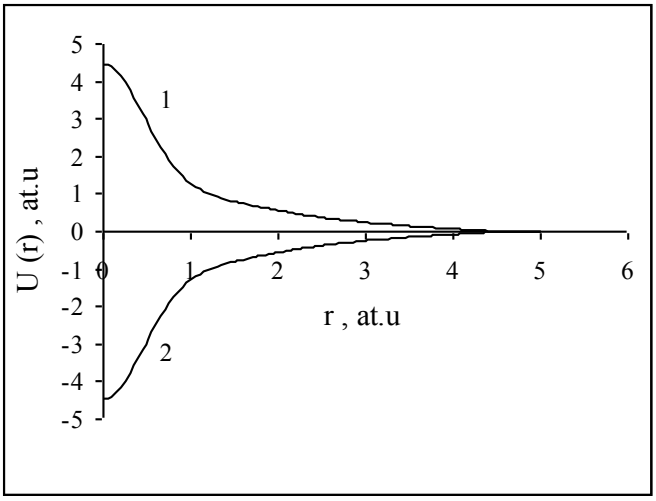


Рис.2.
Возмущающий потенциал, создаваемый в в узлах GeSe дефектами замещения:
1- Ge_{Se} , 2- Se_{Ge}

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Метод сильной связи применен для расчета зонной структуры и исследования глубоких уровней антиструктурных дефектов Ge_{Se} и Se_{Ge}. При этом были использованы слетеровские орбитали s-, p- и d-типа для конструирования Блоховских сумм. Преимуществом данного метода является то, что в этом методе сравнительно малым числом базисных функций (по сравнению с методом псевдопотенциала) можно получить приемлемые результаты. Далее, так как в этом методе волновые функции кристалла выражаются непосредственно через волновые функции атомов кристалла, можно проследить качественно и количественно корреляцию между свойствами кристалла и свободных атомов, составляющих кристалл.

Показано, что при малости чисел базисных функций Блоховской суммы точность результатов можно улучшить добавлением более высоких атомных орбиталей и варьированием их относительных весов.

Авторы выражают искреннюю благодарность акад. Ф.М.Гашимзаде за полезные советы и за многочисленные обсуждения.

1. O.V.Farberovich, A.Yaresko, K.Kikoin and V.Fleurov, *Phys. Rev.,* **B78** (2008) 085206.
2. М.Ланно, Ж.Бургуэн, *Точечные дефекты в полупрводниках. Теория., Мир, М.,* (1984) 264.
3. Ф.М.Гашимзаде, В.Е.Харциев, *ФТТ*, **4** (1962) 434.
4. P.Kruger and J.Pollmann, *Phys. Rev*., **B15** (1988) 10578.
5. J.Bernholc, Nunzio O. Lipari, and S.T.Pantelides, *Phys. Rev.,* **B8** (1980) 3545.
6. D.J.Chadi, *Phys. Rev.,* **B8** (1977) 3572.
7. G.Bachelet, D.Hamann and M.Schluter, *Phys. Rev.,* **B8** (1982) 4199.
8. P.Kemeny, J.Azoulay, M.Cardona et. al., *Nuovo Cimento,* **39B** (1977) 709.

GeSe BIRLƏŞMƏSININ ZONA QURULUŞUNUN AOXK METODU ILƏ HESABLANMASI VƏ Ge_{Se}, Se_{Ge} ANTISTRUKTUR DEFEKTLƏRININ DƏRIN SƏVIYYƏLƏRININ TƏDQIQI

Z.A.JAHANGIRLI, G.S.ORUCOV

Grin funksiyası metodu ilə GeSe kristalında Ge_{Se} və Se_{Ge} antistruktur defektlərinin dərin electron səviyyələri hesablanmışdır. s-, p-və d-tip Sleter orbitallarından istifadə etməklə AOXK metodu ilə GeSe yarımkeçirici birləşməsinin electron quruluşu hesablanmışdır. Hesablanmış electron spectrləri daha dəqiq müstəvi dalğa bazisində psevdopotensial metodu ilə alınmış nəticələrlə üst-üstə düşür.

BAND STRUCTURE CALCULATION OF THE GeSe COMPOUND BY LCAO METHOD AND INVESTIGATION OF DEEP LEVELS OF THE ANTISITE DEFECT Ge_{Se} AND Se_{Ge}

Z.A.JAHANGIRLI, G.S.ORUDJEV

The electronic structure of antisite defects Ge_{Se} and Se_{Ge} has been considered in terms of the Green's function theory. Using s-, p- and d-type Slater's orbital by LCAO method electronic states of semiconductor compound GeSe have been calculated. Calculated electronic spectra have been in good agreement with the results of more exact calculations carried out by plane wave based pseudopotential method.

Редактор: М.Бабаев

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБИРОВАННЫХ ПЛЕНОК ВОДЫ НА ГИДРОФОБНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ МЕТОДАМИ АТОМНО-СИЛОВОЙ МИКРОСКОПИИ

С.Д.АЛЕКПЕРОВ

Институт физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г. Джавида, 33
Филиал МГУ им. М.В. Ломоносова г. Баку
AZ 1141, Баку, ул. Ф. Агаева, 14

Методами атомно-силовой микроскопии исследованы морфологии двух гидрофобных поверхностей: графита (*HOPG*) и окиси алюминия (Al_2O_3). Установлено, что при повышенной влажности окружающей среды ($p/p_s \geq 90\%$) сам процесс сканирования АСМ может приводить к образованию слоя адсорбированной воды даже на гидрофобной поверхности.

ВВЕДЕНИЕ

Атомно-силовая микроскопия (АСМ), позволяющая проводить исследования на микро- и наноуровне, является, на сегодняшний день, одной из востребованных методик. При АСМ исследованиях для получения точной информации о свойствах поверхности необходима прежде всего определенность параметров самого зонда – геометрическая форма, радиус острия, материал зонда, коэффициент упругости кантилевера. Кроме того, необходима максимальная «идеальность» условий эксперимента – отсутствие поверхностных слоев адсорбата на зонде и образце, стабильная температура, влажность и т.д. Это связано с тем, что всю информацию об исследуемой поверхности в АСМ получают из силовых кривых (СК), каждая из которых характеризует собой некую частную физическую систему, в которую входят зонд, точка на исследуемой поверхности и окружающая их среда. Поэтому даже при известных параметрах зонда, наличие, например, пленки адсорбированной воды может существенно исказить результаты исследований, поскольку при этом меняются все параметры самих СК. Это может служить причиной наличия артефактов в различных АСМ экспериментах и вызывать большие трудности при интерпретации полученных данных. Определяющими причинами здесь являются толщина и характер распределения слоя адсорбированной воды на поверхности. Как известно, адсорбированная пленка воды по своим свойствам (например, меньшая на порядок диэлектрическая проницаемость, возрастание вязкости и др.) сильно отличается от свойств воды в объеме. Причина заключается в том, что в самой пленке адсорбированной воды происходят некие структурные изменения, вызванные влиянием поверхности твердого тела. С учетом современных представлений, твердое тело посредством образования водородных связей «программирует» изменения во взаимном расположении молекул воды в приповерхностном слое. Поскольку образованные межмолекулярные водородные связи распространяют эти изменения на расстояния ≥ 10*нм*, стабильность адсорбционного слоя на поверхности оказывается достаточно высокой. Фактически, здесь имеет место своеобразное эпитаксиальное влияние на расположение молекул воды в граничном слое со стороны твердого тела. Сама толщина равновесного адсорбированного слоя воды зависит от многих факторов, важнейшими из которых являются род материала адсорбированной поверхности и относительная влажность воздуха. Материал адсорбента обуславливает концентрацию и энергию водородных связей между активными центрами поверхности твердого тела и молекулами воды граничного слоя, что, в итоге, естественно, влияет на толщину всего слоя. Относительная влажность воздуха определяет толщину адсорбата, при которой степень ослабления водородных

связей соответствует наступлению баланса потоков массопереноса между двумя фазами. В данной работе варьированию подвергались оба указанных фактора. В качестве адсорбирующей поверхности были выбраны две гидрофобные поверхности: атомарно-гладкая поверхность высокоориентированного пиролитического графита (*HOPG*) и пористая, со сложным рельефом, поверхность окиси алюминия (Al_2O_3). Что касается второго фактора, то относительная влажность окружающей среды изменялась в диапазоне $10\% \leq p/p_s \leq 96\%$.

МЕТОДИКА ПРОВЕДЕНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА

С учетом специфики проводимого эксперимента при исследовании образцов был использован режим «*MD-AFM*» [1-3]. Вкратце алгоритм исследования образца в режиме «*MD-AFM*» состоит в следующем: зонд, двигаясь по П-образной траектории в вертикальной плоскости, сканирует исследуемый участок шаг за шагом, измеряя в каждой точке СК. Принципиальной особенностью алгоритма движения зонда является перемещение из точки в точку при отсутствии взаимодействия между зондом и поверхностью. В процессе сканирования на полученных СК можно выделить ряд характерных точек, положение которых связано с особенностями процесса взаимодействия зонда с исследуемой поверхностью. На Рис.1 представлена типичная СК подвода (а) и отвода (б) для системы «слой адсорбата-поверхность графита». По оси ординат отложена величина регистрируемого смещения конца кантилевера с зондом – *S*, по оси абсцисс – задаваемая координата положения образца по вертикали – *Z*. Когда зондовый датчик, состоящий из держателя самого зонда и соединяющего их упругого элемента – кантилевера, находится на некотором удалении от поверхности образца, он подвергается воздействию только дальнодействующих сил: Ван-дер-ваальсовых, электростатических и др. (участок «1-2», Рис. 1(а)). Здесь точка «1» - начало бесконтактного взаимодействия, точка «2» - характеризует градиент взаимодействия зонда с поверхностью, который равен коэффициенту упругости кантилевера. Если начать постепенно подводить зонд к поверхности, то в определенной точке подвода (точка «2», Рис. 1(а)), при условии достаточной чувствительности кантилевера будет наблюдаться резкое увеличение его продольного изгиба, свидетельствующее о соответствующем увеличении силы притяжения острия зонда к образцу. Это можно интерпретировать как начало слияния адсорбата образца с адсорбатом острия зонда в результате их соприкосновения. Образованный при этом мениск стремится к уменьшению площади своей поверхности, что и обуславливает капиллярную силу притяжения [4]. На Рис. 1(а) этому моменту соответствует точка «3» - точка касания зондом поверхности адсорбированного слоя воды. Далее идет точка «4», которая характеризует градиент взаимодействия зонда с поверхностью (который равен коэффициенту упругости кантилевера) уже внутри адсорбированного слоя и точка «7» - точка равенства сил отталкивания и притяжения (положение недеформированной поверхности). Выбранный участок поверхности сканировался АСМ в режиме «*MD-AFM*», при этом в каждой точке одновременно регистрировался ряд параметров. При подводе регистрировалась координата точки касания зондом поверхности адсорбированного слоя воды (точка «3», Рис. 1(а)), а затем – координата точки непосредственного механического контакта зонда с поверхностью (точка «6», Рис. 1(а)). При отводе регистрировалась величина абсолютного максимума СК *S(Z)* (точка «8», Рис. 1(б)). В итоге получались три карты исследованного участка: карта топографии поверхности (точка «6», Рис. 1(а)), карта распределения сил адгезии (точка «8», Рис. 1(б)) и карта распределения толщины адсорбированного слоя. Последняя представляет собой разность

координат точек «3» и «6» (Рис. 1(а)) и дает (с точностью до шага подвода) искомую толщину адсорбированного слоя $Z_{a.c.}$. Расчетная формула при этом имеет следующий вид [4]:

$$Z_{a.c.} = Z_3 - Z_6 + K(S_3 - S_6), \qquad \text{где } K = \Delta Z/\Delta S,$$

здесь Z_3, Z_6 – коэффициенты положения поверхности образца в точках «3» и «6»; S_3, S_6 – величины регистрируемого смещения конца кантилевера с зондом в точках «3» и «6»; K – коэффициент пропорциональности сигнала S изгиба кантилевера (определяется по линейному участку кривой подвода «6-7»); ΔZ и ΔS – параметры линейного участка.

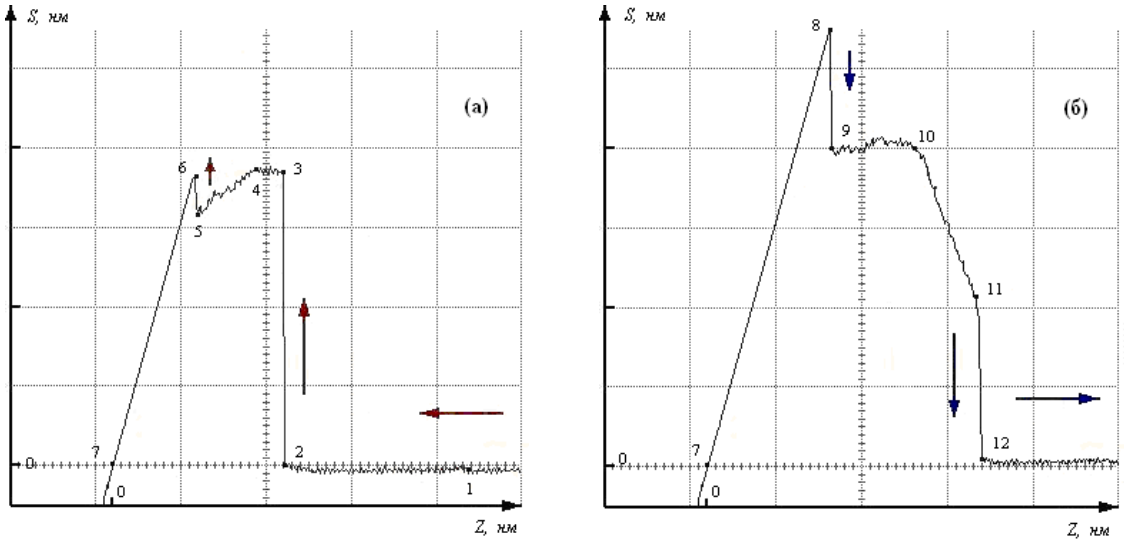


Рис.1.

Силовая кривая *S(Z)* подвода (а) и отвода (б) для системы «слой адсорбата –поверхность графита».

Образец графита фактически играл роль своеобразной тестовой структуры в данном эксперименте. Это связано с тем, что на поверхности графита легко получить большие атомарно-гладкие площадки, и на ней практически не адсорбируются кислород и другие газы, что позволяет получить изображение поверхности с атомарным разрешением даже на воздухе. Кроме того, высокая плоскостность и однородность поверхности графита минимизируют влияние рельефа на параметры СК, получаемых АСМ. Вдобавок, адсорбированные пленки воды на поверхности графита достаточно хорошо изучены. Так, на изотерме сорбции воды монокристалла графита можно выделить три характерных участка, в которые легко попадают условия измерений: 1) единичные молекулы на поверхности ($0\% \le p/p_s \le 5\%$); 2) островковые пленки воды ($15\% \le p/p_s \le 60\%$); 3) сплошная пленка воды с микрокаплями ($60\% \le p/p_s \le 100\%$). Отсюда следует, что при анализе экспериментальных данных можно считать, что в зависимости от уровня влажности окружающей среды на поверхности графита изменяется количество молекул воды и различия, получаемые на СК, вызваны только этими изменениями (совместно с изменениями количества воды на зонде). В противоположность первому образцу вторым образцом была выбрана окись алюминия (Al_2O_3), имеющая пористую гидрофобную поверхность со сложным рельефом. Измерения проводились в специальной камере в изотермических условиях (293*K*) в диапазоне относительной влажности окружающей среды $10\% \le p/p_s \le 96\%$ (относительная влажность измерялась на термогигрометре “Wendox” с точностью ~1%). Для исключения процесса переноса воды с зонда на поверхность и наоборот использовался гидрофобный пирамидальный зонд из нитрида кремния (Si_3N_4). В

экспериментах использовались два различных зонда: с радиусом острия ~65*нм* (угол конусности острия ~37°) и с радиусом острия ~12*нм* (угол конусности острия ~24°), при этом в обоих случаях использовался кантилевер с коэффициентом упругости ~0,2*Н/м*.

ОБСУЖДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

В первом эксперименте зонд подводился к поверхности до момента наступления механического контакта с ней (точка «7», Рис. 1(а)), при этом каждый раз менялась сила прижима зонда к поверхности, достигаемая в конце процесса подвода (для экспериментов использовался зонд с радиусом острия ~65*нм*). На Рис.2 показана зависимость между измеряемой толщиной адсорбированного слоя $Z_{a.c.}$ и силой прижима F зонда к поверхности графита (p/p_s≈55%). Легко видеть, что, начиная с≈6*нН*, среднее значение определяемой суммарной толщины адсорбата переставало возрастать и оставалось постоянными вплоть до возникновения неупругих деформаций поверхности образца. С учетом того факта, что энергия водородных связей между молекулами адсорбата воды много меньше энергии связей атомов твердого тела самого образца, можно считать, что, определяемая подобным образом сила обеспечивает выполнение условия полного вытеснения адсорбата между зондом и поверхностью.

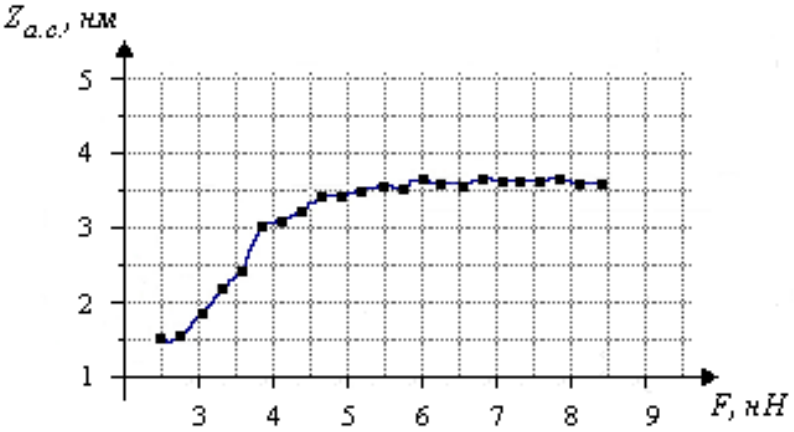


Рис. 2.
Зависимость между измеряемой толщиной адсорбированного слоя $Z_{a.c.}$ и силой прижима F зонда к поверхности графита (p/p_s ≈ 55%).

На Рис.3 представлены СК (подвода и отвода), полученные при уровне относительной влажности окружающей среды 10%≤p/p_s≤60% (радиус острия зонда ~65*нм*) для окиси алюминия (а) и графита (б).

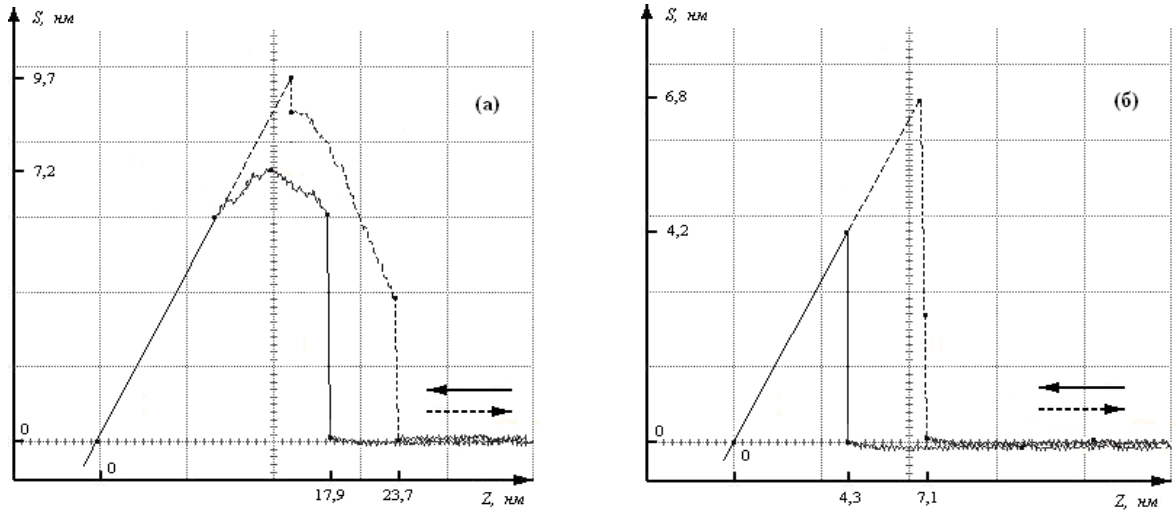


Рис. 3.
Силовые кривые (подвода и отвода) для Al_2O_3 (а) и *HOPG* (б) при 10%≤p/p_s≤60%.

Нетрудно заметить, что в случае поверхности окиси алюминия (Рис.3(а)) сама форма СК ясно указывает на скопление молекулярных слоев адсорбированной на поверхности Al_2O_3 воды. Налицо характерные области прохождения зондом слоя адсорбата и выхода из него. Форма этих СК показывает, что вода внутри адсорбата оказывала сопротивление прохождению зонда, что свидетельствовало о ее жидком состоянии, т.е. налицо наличие капиллярных эффектов [6,7]. Состояние воды в подобных адсорбированных слоях, очевидно, можно назвать конденсированной жидкостью, причем основными центрами конденсации в данном случае являются внутренние пространства (т.е. поры) самого материала. Таким образом, эксперимент показал, что при уровне относительной влажности окружающей среды $10\% \leq p/p_s \leq 60\%$ на поверхностях гидрофобных пористых материалов в результате капиллярной конденсации находится слой адсорбированной воды. Поэтому процесс формирования любого адсорбционного слоя воды в данном случае управляется структурой и топологией пор поверхности. В случае гидрофобной плоской поверхности графита ситуация с наличием адсорбированной воды резко отличается от случая гидрофобной пористой поверхности. Как видно из Рис.3(б), при уровне относительной влажности окружающей среды $10\% \leq p/p_s \leq 60\%$ на поверхности пиролитического графита находится высокоподвижный слой воды (двумерный пар), т.е. вода в данном случае находится или в конденсированном виде (в незначительном количестве) или в газообразном состоянии в приповерхностном слое, что практически не влияет на АСМ измерения. Как показали эксперименты, на гидрофобных ровных поверхностях, подобных графиту, адсорбированные слои конденсированной воды присутствуют только при повышенной влажности окружающей среды, концентрируясь преимущественно около различных неоднородностей и дефектов поверхности, являющихся центрами конденсации. Таким образом, анализ СК, зарегистрированных на поверхности графита и окиси алюминия, показал, что при малом ($0\% \leq p/p_s \leq 10\%$) и среднем ($10\% \leq p/p_s \leq 60\%$) уровнях влажности окружающей среды скорость конденсации воды на пористых гидрофобных поверхностях намного превышает скорость конденсации воды на ровных гидрофобных поверхностях. Кроме того, проведенные исследования показали, что при исследовании гидрофобных поверхностей при повышенной влажности воздуха ($p/p_s \geq 90\%$) методом АСМ сам процесс исследования может вызвать образование водных слоев на поверхности, которые влияют на результаты эксперимента. Для демонстрации этого явления был проведен эксперимент на ровной и пористой гидрофобных поверхностях. В процессе сканирования на обеих поверхностях начинался процесс конденсации воды в точке контакта зонда с поверхностью. Поэтому при вторичном сканировании данного участка поверхности на нем обнаруживался слой адсорбированной воды.

Совершенно очевидно, что измеряемая АСМ сила адгезии зависит от размеров острия зонда [5]. Чем больше радиус острия зонда, тем больше площадь эффективного контакта и тем большая требуется сила, чтобы оторвать зонд от поверхности. Например, полученные в эксперименте типичные значения силы адгезии между поверхностью графита и стандартным АСМ зондом из нитрида кремния (Si_3N_4) при типичной лабораторной относительной влажности окружающей среды $30\% \leq p/p_s \leq 50\%$ (данный диапазон уже достаточен для образования адсорбированных пленок воды на поверхности образцов) составили около 60*нН* для зонда с радиусом острия ~65*нм* и около 6,5*нН* для зонда с радиусом острия ~12*нм*. Причина большой величины адгезии на воздухе связана с тем, что большинство поверхностей в этих условиях покрыты тонким слоем воды. При приближении зонда к адсорбату вода образует мениск вокруг зонда, в результате

чего образуется капиллярный мостик между зондом и поверхностью. Однако при погружении в жидкость всего кантилевера капиллярные силы значительно уменьшаются. Например, для зонда с радиусом острия ~65нм сила адгезии, как уже было сказано, составила 60*нН* (при 30%≤p/p_s≤50%), а при погружении в жидкость всего кантилевера сила адгезии уже была ~2*нН*.

Таким образом, наличие адсорбированного слоя воды может вносить дополнительный вклад в результаты АСМ даже на гидрофобных поверхностях. Однако, с другой стороны, этот эффект может быть использован для обнаружения и идентификации разных фаз материала поверхности.

1. С.П.Молчанов, В.В.Дремов, А.П.Кирпичников*, Патент № 2145055*, *Российская Федерация,* (2000).
2. S.H.Abdullayeva, S.P.Molchanov, N.T.Mamedov, S.D.Alekperov, *Physica Status Solidi (c),* **3** № 8 (2006) 2853.
3. S.P.Molchanov, I.A.Chernova-Kharaeva, S.H.Abdullayeva, S.D.Alekperov, *Physica ANAS*, **XI** № 1-2 (2005) 56.
4. А.Н.Булатов, С.В.Хартов, *Известия вузов. Электроника*, №4 (2004) 9.
5. A.L.Weisenhorn, P.K.Hansma, T.R.Albrecht, C.F.Quate, *Appl. Phys. Lett.,* **54** (1989) 2651.
6. А.К.Гатин, М.В.Гришин, Ф.И.Далидчик, С.А.Ковалевский, Н.Н.Колченко, *Химическая физика*, **25** №6 (2006) 17.
7. Ю.М.Ефремов, Д.В.Багров, И.В.Яминский, *Сборник тезисов III международной конференции «Современные достижения бионаноскопии», Москва, 16-18 июня* (2009) 28.

HİDROFOB SƏTHLƏRİN ÜZƏRİNDƏ ATOM-QÜVVƏ MİKROSKOPİYA METODLARI İLƏ NAZİK ADSORBAT SU TƏBƏQƏLƏRİNİN TƏDQİQİ

S.C.ƏLƏKBƏROV

İşdə, atom-qüvvə mikroskopiya metodları ilə, iki hidrofob səthlərin morfoloqiyası tədqiq edilmişdir: qrafit (*HOPG*) və alüminium oksidi (Al_2O_3). Müəyyən olunmuşdur ki, ətrafda rütübətin səviyyəsi yüksək olduğu halda ($p/p_s \geq 90\%$), AQM-n skan prosesin özü hətta hidrofob səthin üzərində adsorbat su layın əmələ gəlməyinə nəticədə gətirə bilər.

INVESTIGATION THE ADSORBED FILMS OF WATER ON THE HYDROPHOBIC SURFACES BY ATOMIC-FORCE MICROSCOPY METHODS

S.D.ALEKPEROV

The morphologies of two hydrophobic surfaces: graphite (*HOPG*) and oxide of aluminum (Al_2O_3) has been investigated by atomic-force microscopy. It has been determined that AFM's scanning process itself may leads to the formation of the adsorbed layers of water even on the hydrophobic surface.

Редактор: Х.Везиров

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ВЛИЯНИЕ γ- ОБЛУЧЕНИЯ НА ПРОВОДИМОСТЬ КРИСТАЛЛОВ $TlInS_2$<Cr> В ПЕРЕМЕННОМ ПОЛЕ

Р.М.САРДАРЛЫ, О.А.САМЕДОВ, И.И.АСЛАНОВ, А.П. АБДУЛЛАЕВ, Ф.Т.САЛМАНОВ, М.М.КУЛИЕВ

Институт радиационных проблем НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, ул.Ф.Агаева, 9

Исследованы температурные зависимости электропроводимости σ(T) в переменном электрическом поле на γ-облученных образцах кристаллов $TlInS_2$<Cr>. Установлен прыжковый механизм проводимости. Рассчитаны энергии активаций, концентрация дефектов, длины прыжков, разброс ловушечных состояний, плотность локализованных состояний, температуры Фогеля-Фулчера (T_f) и Бернса (T_d) при различных дозах радиационного воздействия. Также показано, что в интервале частот 1кГц÷1МГц электропроводимость подчиняется закону $\sigma(\omega)\sim\omega^{0,8}$.

В работах [1-4] нами было показано, что размытие температурной зависимости диэлектрической проницаемости в кристаллах $TlInS_2$ (легированных Ян-Тейлоровскими примесями) связано с тем, что локализованные заряды создают локальные электрические поля, тем самым, стимулируя возникновение индуцированной поляризации. Частотная дисперсия диэлектрической восприимчивости определяется колебательными свойствами локальных состояний и зависит от динамики электронов на уровнях прилипания. В работах [3,4] показано, что примеси Cr в кристалле $TlInS_2$ создают высокую плотность состояний, локализованных вблизи уровня Ферми. Локализованные в запрещенной зоне состояния ответственны за большинство электронных процессов, протекающих в кристаллах $TlInS_2$<Cr>.

В настоящей работе представлены результаты исследования температурной зависимости электропроводности σ(T) кристалла $TlInS_2$<Cr> в переменном электрическом поле в интервале частот 1кГц÷1МГц и влияние γ-облучения на эти свойства.

Облучение образцов проводилось при комнатной температуре на γ-установке Co^{60}. Доза облучения накапливалась путем последовательных экспозиций в одном и том же образце и составляла 200, 400, 600Мрад. Измерения σ(T) проводились после каждого облучения.

Для измерений температурных зависимостей диэлектрической проницаемости и электропроводности материалов $TlInS_2$<Cr> были изготовлены конденсаторы, диэлектриком в которых служили пластинки исследуемых материалов. Обкладками конденсаторов служили серебряные контакты, нанесенные на поверхность пластинок. Исследования электропроводности проводились цифровым измерителем иммитанса Е7-20 на частотах 1÷1000кГц в интервале температур 100÷300K. Амплитуда измерительного поля не превышала $1В\cdot см^{-1}$.

Температурные зависимости электропроводности σ(T) кристалла $TlInS_2$<Cr>, облученные дозами до 600Мрад, приведены на Рис.1. На кривых lnσ(1/T) можно выделить три температурные области, характеризующиеся различными механизмами проводимости. Температурная область, лежащая выше температуры Бернса (T_d=210K), описывается линейной зависимостью σ(T), что характерно для зонной проводимости. В интервале температур T_d–T_f зависимость σ(T) удовлетворительно описывается законом Мотта [5], что соответствует прыжковому механизму проводимости. Именно в этом температурном интервале соединение $TlInS_2$<Cr> находится в состоянии сегнетостекла. В диапазоне температур ниже Фогелла-Фулчера (T_f=170K) проводимость практически не зависит от температуры.

Температурная область, лежащая между T_f и T_d характеризуется участком, в котором наблюдается слабая температурная зависимость проводимости выше температуре 210К. Следует отметить, что такой характер проводимости при низких температурах (T<170K) характерен для кристаллов этого класса [6,7]. Он свидетельствует о наличии безактивационной прыжковой проводимости, при которой, прыжки носителей заряда по локализованной зоне происходят с испусканием фонона . Для γ-облученного соединения $TlInS_2$<Cr> такой характер проводимости наблюдается ниже 170К, то есть в упорядоченной сегнетоэлектрической фазе. Механизм же ослабления температурной зависимости участка проводимости в температурной области T_f-T_d, на наш взгляд, принципиально иной. Как известно, эта температурная область характеризуется нарушением трансляционно-инвариантной периодичности кристаллической решетки $TlInS_2$<Cr> и возникновением сверхструктуры не кратной исходной трансляции решетки. В этом случае происходит расщепление параболических зон в мини зоны, разделенные малыми запрещенными энергетическими зонами и имеющими зону Бриллюэна, определяемую периодом сверхрешетки.

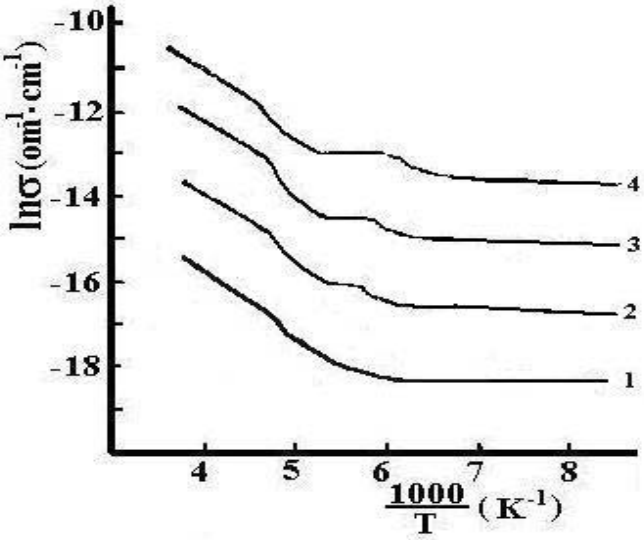


Рис.1.
Температурная зависимость электропроводности σ(T) кристаллов $TlInS_2$<Cr> , где Cr – 0.1атм.%. (кривая 1 – 0, 2 – 200, 3 – 400, 4-600Мрад).

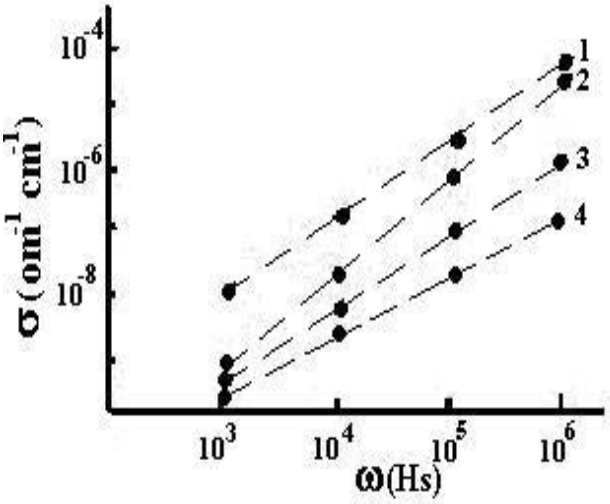


Рис.2.
Частотная зависимость электропроводности σ(ω) для кристаллов $TlInS_2$<Cr> (кривая 1 – 1, 2 – 10, 3 – 100кГц, 4 – 1МГц).

Частотная зависимость проводимости, для перескокового переноса заряда носителями с энергиями вблизи уровня Ферми должна быть $\omega\left[\ln\frac{\nu_{фон}}{\omega}\right]$, т.е. приблизительно пропорциональна $\omega^{0,8}$ (n=0,8), когда $\omega \ll \nu_{фон}$ проводимость согласно [5] определяется формулой

$$\sigma(\omega)=\frac{\pi^3}{96}e^2KT\left[N(E_F)\right]^2\alpha^{-5}\omega\left[\ln\left(\frac{\nu_{фон}}{\omega}\right)\right]^4, \qquad (1)$$

где e – заряд электрона, K – постоянная Больцмана, N_F – плотность локализованных состояний вблизи уровня Ферми, $a=\frac{1}{\alpha}$ – радиус локализации, α – постоянная спада волновой функции локализованного носителя заряда $\Psi \sim e^{\alpha r}$, ν – фононная частота.

Формула (1) позволяет определить плотность состояний на уровне Ферми $N(E_F)$ кристалла $TlInS_2$<Cr>

$$N^2(E_F) = \frac{96\sigma(f)\alpha^5}{\pi^3 e^2 KTf\left[\ln\left(\frac{\nu_{фон}}{f}\right)\right]^4}. \quad (2)$$

Если T=190K, $\nu_{фон}=10^{12}$Гц, f=10^6Гц, то при температуре T=190K получаем

$$N_F^2 = 1{,}2\cdot 10^{48}\sigma(f)\alpha^5. \quad (3)$$

Значение плотности состояний N_F при температуре T=190K (нанодоменное состояние) кристалла $TlInS_2$<Cr>приведены в Таблице 1. Радиус локализации составляет a=30 Å для необлученного образца, и a=25Å для облученного.

Теория прыжковой проводимости в переменных электрических полях позволяет по формуле [5,9] определить среднее время и среднее длину прыжка носителя заряда из одного локализованного состояния в другое

$$\tau^{-1} = \nu_{фон}\exp(-2R\alpha), \quad (4)$$

$$R = (1/2\alpha)\ln(\nu_{фон}/f). \quad (5)$$

Для $TlInS_2$<Cr> средняя длина прыжка оказалась равной R=210 Å для необлученного кристалла, и R=173 Å для облученного.

На Рис.2 приведены результаты исследований частотной зависимости электропроводности кристалла $TlInS_2$<Cr> в переменном электрическом поле при температуре T=200K. Как видно из Рис.2, в области частот $10^3 \div 10^6$Гц электропроводность изменяется по закону близкой к $\omega^{0,8}$. Это свидетельствует о прыжковом механизме переноса заряда по состояниям, локализованным в окрестности уровня Ферми [5]. Полученные результаты при исследовании электропроводности кристалла $TlInS_2$<Cr> при приложении переменного электрического поля сведены в Таблице 1.

Таблица 1.

Электрические параметры необлученных и облученных соединений $TlInS_2$<Ge>.

$TlInS_2$<Cr>	$N_F(eV^{-1}cm^{-3})$	R(A)	ΔE(eV)
D=0	$7.8\cdot 10^{17}$	210	0.036
D=200 Mrad	$1.46\cdot 10^{18}$	192	0.031
D=400 Mrad	$1.83\cdot 10^{18}$	173	0.027
D=600Мрад	$3{,}08\cdot 10^{18}$	160	0,023

Показано, что в кристалле ниже температуры Бернса (T_d) имеет место прыжковая проводимость при этом, до температуры Фогеля-Фулчера (T_f) наблюдается термоактивационная, а ниже T_f – безактивационная прыжковая проводимость.

Таким образом, воздействием γ-облучения можно изменять диэлектрические и электрические свойства сегнетоэлектриков $TlInS_2$<Cr>.

Исследования зависимостей σ(T) в γ-облученных кристаллах $TlInS_2$<Cr> позволили установить связь между динамикой поведения релаксоров, в которых релаксорное состояние возникает вследствие закрепления неоднородной поляризации в нанообластях в результате локализации зарядов на дефектах, с электрической проводимостью, которая имеет прыжковый характер, и обусловлена термоактивационными процессами состояний дефектных уровней в облученном кристалле $TlInS_2$<Cr>. В зависимости от дозы облучения энергия активации, концентрация радиационных дефектов, длина прыжка, разброс ловушечных состояний и плотность локализованных состояний сильно изменяется. Также показано, что в интервале частот 1кГц÷МГц электропроводимость подчиняется закону близкой к $\sigma(\omega)\sim\omega^{0,8}$.

Р.М.Сардарлы, О.А.Самедов, А.И.Наджафов, И.Ш.Садыхов, *ФТТ*, **45** (2003) 1085.
Р.М.Сардарлы, О.А.Самедов, И.Ш.Садыхов, *ФТТ*, **46** (2004), 1852.
A.Sardarli, I.M.Filanovski., R.M.Sardarli. et al., *Journal of optoelectronics and advanced materials,* **5** № 3, (2003), 276.
A.Sardarli, I.M.Filanovski, R.M.Sardarli et al., *Proceedings of International Conference on MEMS, NANO and Smart Systems. Banff, Alberta, Canada*, (2003) 218.
Н.Мотт, Э.Девис, *Электронные процессы в некристаллических веществах. М.: Мир,* (1974) 472.
С.Н.Мустафаева, В.А.Алиев, М.М. Асадов, *ФТТ*, **40** (1998) 48.
С.Н.Мустафаева, В.А.Алиев, М.М.Асадов, *ФТТ,* **40** (1998) 612.
A.R.Jonscher, *Scientific papers of the Institute of Electricals Engeneering Fundamentals.Seria Wspolpraca,* **16** №1 (1977) 5. Wydavnictwo Politechnik Wroclawskiej, Wroclav.
Б.Н.Шкловский, А.Л.Эфрос, *Электронные свойства легированных полупроводников М.: Наука,* (1979) 416.

γ- ŞÜALARININ $TlInS_2$ <Cr> KRİSTALLININ ELEKTRİK XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

R.M.SARDARLI, O.Ə.SƏMƏDOV, İ.İ.ASLANOV, A.P.ABDULLAEV, F.T.SALMANOV, M.M.QULUEV

γ-şüalarla şüalanmış $TlInS_2$<Cr> kristallının dəyişən elektrik sahəsində elektrik keçiriciliyi σ(T) tədqiq edilmışdır. Göstərilmişdir ki, şüalanma dozasından aslı olaraq, aktivasiya enerjisi, radiasiya defeklərinin konsentrasiyası, sıçrayışın uzunluğu, tələ hallarının enerjisi, Foqel-Fulçer (T_f) və Berns (T_d) temperaturları dəyişikliklərə məruz qalır. Həmçinin göstərilmişdir ki, 1кHs÷1MHs tezlik intervalında elektrik keçiriciliyi $\sigma(\omega)\sim\omega^{0,8}$ qanununa tabedir.

INFLUENCE OF γ- IRRADIATIONS ON ELECTRIC PROPERTIES OF $TlInS_2$ <Cr> CRYSTALS

R.M.SARDARLY, O.A.SAMEDOV, I.I.ASLANOV, A.P.ABDULLAEV, F.T.ALMANOV, M.M.QULUEV

Temperature dependences conductivity σ(T) in the γ-irradiated samples of $TlInS_2$<Cr> crystals have been investigated. Energy activation, concentration of defects, lengths of jumps, disorder impurity conditions, density of the localized conditions, temperatures of Fogel-Fulchers (T_f) and Burns (T_d) have been calculated, at various dozes of radiating influence. Also it has been shown, that in the range of frequencies 1кГц÷1МГц conductivity submits to the law near to the $\sigma(\omega) \sim \omega^{0,8}$.

Редактор: Т.Мамедов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

НЕПРЕРЫВНЫЕ ДУАЛЬНЫЕ МНОГОЧЛЕНЫ ХАНА И ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О РЕЛЯТИВИСТСКОМ СИНГУЛЯРНОМ ОСЦИЛЛЯТОРЕ

Ш.М.НАГИЕВ, Э.И.ДЖАФАРОВ, Р.М.ИМАНОВ*

Институт Физики НАНаук Азербайджана
AZ 1143, г. Баку, пр. Г. Джавида, 33
*Гянджинский Государственный Университет, Факультет Физики**
AZ 2700, г. Гянджа, ул. А. Джамила, 1

Рассматривается конечно-разностное уравнение для непрерывных дуальных многочленов Хана. Показано, что, применяя определенный подход, это уравнение преобразовывается в конечно-разностный аналог уравнения Шредингера, которое описывает стационарные состояния задачи о релятивистском линейном сингулярном осцилляторе в координатном представлении.

Нерелятивистский квантовый осциллятор в сингулярном поле формы g/x^2 или, так называемый нерелятивистский квантовый сингулярный осциллятор, является одной из самых интересных задач квантовой физики. Сам по себе потенциал формы $m\omega^2x^2/2+g/x^2$ в нерелятивистском подходе привлекателен для исследователей тем, что это точно решаемая модель, и динамическая система подчиняется $su(1,1)$ алгебре Ли. Потенциал по всей действительной области координаты ведет себя почти как нерелятивистский квантовый гармонический осциллятор и только в начале координат стремится к бесконечности, что и позволяет рассмотреть все задачи, описанные с помощью модели нерелятивистского гармонического осциллятора в смысле падения на центр. Энергетические состояния этой модели тоже находятся точно из решения соответствующего уравнения Шредингера, и по виду, на первый взгляд, они идентичны модели гармонического осциллятора: они дискретны, эквидистантны и основное состояние, как и в случае с гармоническим осциллятором, отличается от нуля. Но спектр имеет одно очень важное отличие – содержит в себе постоянную сингулярности g. Именно эта постоянная может принимать такие значения, при которых энергия каждого состояния становится комплексной. Комплексность энергии каждого состояния и дает нам возможность понимания поведения частицы, описанной гармоническим осциллятором во время падения на центр. Другими словами, частица в поле параболической формы с энергией, равной действительной части комплексного значения спектра, не может пройти через барьер бесконечных размеров в начале координат и со временем жизни, равным половине мнимой части энергетического спектра, падает на центр [1].

Следует отметить, что в работе [2] рассматривалось обобщение задачи о квантовом сингулярном осцилляторе на релятивистский случай. Было показано, что такая задача тоже имеет точное решение, и ее волновые функции стационарных состояний выражаются через непрерывные дуальные многочлены Хана.

Цель данной работы – показать детально каким образом можно через обычную математическую задачу о рекуррентном соотношении для непрерывных дуальных многочленов Хана восстановить физическую задачу о точном решении конечно-разностного аналога уравнения Шредингера для релятивистского квантового линейного сингулярного осциллятора в координатном представлении.

Непрерывные дуальные многочлены Хана определяются с помощью ${}_3F_2$ гипергеометрических функций и имеют следующий вид [3,4]

$$\frac{S_n\left(x^2;a,b,c\right)}{(a+b)_n(a+c)_n}={}_3F_2\left(\begin{matrix}-n,a+ix,a-ix\\ a+b,a+c\end{matrix};1\right). \qquad (1)$$

Гипергеометрические функции ${}_rF_s$ в свою очередь определяются с помощью выражения [5]

$$ {}_rF_s\left(\begin{matrix} a_1,\ldots,a_r \\ b_1,\ldots,b_s \end{matrix};z\right)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(a_1,\ldots,a_r)_k}{(b_1,\ldots,b_s)_k}\frac{z^k}{k!}, \tag{2} $$

где $(a_1,\ldots,a_r)_k=(a_1)_k\cdots(a_r)_k$ и $(a)_k=a(a+1)(a+2)\cdots(a+k-1)$, $k=1,2,3,\ldots$ называется символом Похгаммера [6].

Конечно здесь параметры должны принимать такие значения, чтобы множители в знаменателе этого ряда никогда не обращались в нуль. Когда один из параметров a_i в числителе этого ряда становится равным $-n$, где n принимает положительные целые числа, то тогда этот гипергеометрический ряд становится многочленом от переменной z [7].

Если a, b и c являются положительными числами, а также не являются комплексно-сопряженными парами с положительной действительной частью, то тогда эти многочлены удовлетворяют следующему условию ортогональности [8]

$$ \frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty}\left|\frac{\Gamma(a+ix)\Gamma(b+ix)\Gamma(c+ix)}{\Gamma(2ix)}\right|^2 S_m\left(x^2;a,b,c\right)S_n\left(x^2;a,b,c\right)dx= \tag{3a} $$
$$ =\Gamma(n+a+b)\Gamma(n+a+c)\Gamma(n+b+c)n!\delta_{mn}. $$

Если $a<0$ и $a+b$, $a+c$ являются положительными числами или же комплексно-сопряженными парами с положительной действительной частью, то тогда условие ортогональности принимает следующую форму

$$ \frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty}\left|\frac{\Gamma(a+ix)\Gamma(b+ix)\Gamma(c+ix)}{\Gamma(2ix)}\right|^2 S_m\left(x^2;a,b,c\right)S_n\left(x^2;a,b,c\right)dx+ $$
$$ +\frac{\Gamma(a+b)\Gamma(a+c)\Gamma(b-a)\Gamma(c-a)}{\Gamma(-2a)}\sum_{\substack{k=0,1,2\ldots\\ a+k<0}}\frac{(2a)_k(a+1)_k(a+b)_k(a+c)_k}{(a)_k(a-b+1)_k(a-c+1)_k k!}(-1)^k\times \tag{3b} $$
$$ \times S_m\left(-(a+k)^2;a,b,c\right)S_n\left(-(a+k)^2;a,b,c\right)=\Gamma(n+a+b)\Gamma(n+a+c)\Gamma(n+b+c)n!\delta_{mn}. $$

Непрерывные дуальные многочлены Хана также удовлетворяют следующему рекуррентному соотношению

$$ -\left(a^2+x^2\right)\widetilde{S}_n\left(x^2\right)=A_n\widetilde{S}_{n+1}\left(x^2\right)-\left(A_n+C_n\right)\widetilde{S}_n\left(x^2\right)+C_n\widetilde{S}_{n-1}\left(x^2\right), \tag{4} $$

где

$$ \widetilde{S}_n\left(x^2\right)=\widetilde{S}_n\left(x^2;a,b,c\right)=\frac{S_n\left(x^2;a,b,c\right)}{(a+b)_n(a+c)_n} $$

и

$$ \begin{cases} A_n=(n+a+b)(n+a+c) \\ C_n=n(n+b+c-1). \end{cases} $$

Используя (4), можно написать нормализованное рекуррентное соотношение для этих многочленов

$$ x\,p_n(x)=p_{n+1}(x)+\left(A_n+C_n-a^2\right)p_n(x)+A_{n-1}C_n\,p_{n-1}(x), \tag{5} $$

где $S_n\left(x^2;a,b,c\right)=(-1)^n p_n(x)$.

Соответственно можно показать, что непрерывные дуальные многочлены Хана являются решениями следующего конечно-разностного уравнения:

$$ n\,y(x)=B(x)y(x+i)-[B(x)+D(x)]y(x)+D(x)y(x-i),\ y(x)=S_n\left(x^2;a,b,c\right), \tag{6} $$

где

$$\begin{cases} B(x) = \dfrac{(a-ix)(b-ix)(c-ix)}{2ix(2ix-1)} \\ D(x) = \dfrac{(a+ix)(b+ix)(c+ix)}{2ix(2ix+1)}. \end{cases}$$

Если в (6) рассмотреть случай $c = 1/2$, то тогда мы получим

$$n\,S_n\left(x^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right) = B_{\frac{1}{2}}(x)S_n\left((x+i)^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right) - \left[B_{\frac{1}{2}}(x) + D_{\frac{1}{2}}(x)\right]S_n\left(x^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right) + D_{\frac{1}{2}}(x)\left((x-i)^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right), \quad (7)$$

в этом случае имеем

$$\begin{cases} B_{\frac{1}{2}}(x) = -\dfrac{(a-ix)(b-ix)}{4ix} \\ D_{\frac{1}{2}}(x) = \dfrac{(a+ix)(b+ix)}{4ix}. \end{cases}$$

Принимая во внимание $f(x+\gamma) = \exp(\gamma\partial_x)f(x)$ в (7) получим следующее разностное уравнение для непрерывных дуальных многочленов Хана:

$$4inx\,S_n\left(x^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right) = [(a+ix)(b+ix)(e^{-i\partial_x}-1) - (a-ix)(b-ix)(e^{i\partial_x}-1)]\,S_n\left(x^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right). \quad (8)$$

Правую сторону этого уравнения можно еще упростить написав его в следующем виде

$$2i(2n+a+b)x\,S_n\left(x^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right) = [(a+ix)(b+ix)e^{-i\partial_x} - (a-ix)(b-ix)e^{i\partial_x}]\,S_n\left(x^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right). \quad (9)$$

Если связать a и b следующим образом

$$a = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{2}{\omega_0{}^2}\left(1 - \sqrt{1 - 8g_0\omega_0{}^2}\right)}, \quad (10)$$

$$b = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{1 + \frac{2}{\omega_0{}^2}\left(1 + \sqrt{1 - 8g_0\omega_0{}^2}\right)}, \quad (11)$$

где $\omega_0, g_0 > 0$, то (9) примет следущий более простой вид

$$2i(2n+a+b)x\,S_n\left(x^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right) = \left[(a+ix)(b+ix)e^{-i\partial_x} - \frac{\omega_0{}^2\left(x^{(2)}\right)^2 + x^{(2)} + 2g_0}{\omega_0{}^2(a-1+ix)(b-1+ix)}e^{i\partial_x}\right]S_n\left(x^2;a,b,\tfrac{1}{2}\right), \quad (12)$$

здесь $x^{(2)} = x(x+i)$.

Умножая (12) с обеих сторон на

$$(-x)^{(a)} = i^a\,\frac{\Gamma(ix+a)}{\Gamma(ix)} \text{ и } M(x) = \omega_0{}^{ix}\Gamma(b+ix). \quad (13)$$

Получаем более компактный вид для (12)

$$\left[\cosh(i\partial_x) + \frac{1}{2}m\omega_0{}^2x^{(2)}e^{i\partial_x} + \frac{g_0}{x^{(2)}}e^{i\partial_x}\right]\psi(x) = \omega_0(2n+a+b)\psi(x), \quad (14)$$

где $\psi(x)$ являясь решением (14) имеет следующий вид

$$\psi(x) \equiv \psi_n(x) = c_n(-x)^{(\alpha)}\omega_0{}^{ix}\Gamma(b+ix)S_n\left(x^2;a,b,\frac{1}{2}\right). \quad (15)$$

Следует отметить, что c_n является постоянной ортогональности и определяется с помощью условия ортогональности для непрерывных дуальных многочленов Хана (3b) и имеет следующий вид

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{\Gamma(n+a+b)\Gamma\left(n+a+\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(n+b+\frac{1}{2}\right)\cdot n!}}.$$

Можно увидеть что разностное уравнение (14) и его решение (15) точно совпадают с релятивистским конечно-разностным аналогом уравнения Шредингера и волновой функцией стационарных состояний задачи о квантовом одномерном сингулярном осцилляторе, которая точно была решена в [2].

Таким образом, используя известные преобразования для гипергеометрических функций вида ${}_3F_2$, мы смогли восстановить физическую задачу о нахождении явного вида волновых функций в координатном представлении для релятивистского линейного сингулярного осциллятора. Мы показали, что конечно-разностное уравнение, с помощью которого описываются непрерывные дуальные многочлены Хана, фактически, является обобщением конечно-разностного аналога уравнения Шредингера. Принимая во внимание, что $g = 0$ восстановливает обычный квантовый гармонический осциллятор, предложенный подход может быть применен и для преобразования конечно-разностного уравнения для многочленов Мейкснера-Поллачека в конечно-разностный аналог уравнения Шредингера для релятивистской задачи об одномерном квантовом гармоническом осцилляторе.

1. V.V.Dodonov, I.A.Malkin, and V.I.Man'ko, *Physica* **72** (1974) 597.
2. S.M.Nagiyev, E.I.Jafarov, R.M.Imanov, *J Phys., A* **36** (2003) 7813.
3. R.Askey, J.A.Wilson, *Some basic hypergeometric orthogonal polynomials that generalize Jacobi polynomials (Memoirs of the American Mathematical Society 319, Providence, Rhode Island)*, (1985).
4. M.E.H.Ismail, J. Letessier, and G.Valent, *SIAM J Math. Anal.,* **20** (1989) 727.
5. G.E.Andrews, R.Askey, and R.Roy, *Special functions (Cambridge University Press,)* (1999).
6. J.F.Steffensen, *Interpolation* (Chelsea Publishing Co.), (1950).
7. G.Szego, *Orthogonal Polynomials* (*Colloquium Publications, American Mathematical Society)*, 1939.
8. T.H.Koornwinder, *Lect. Notes Math.,* **1171** (1985) 174.

KƏSİLMƏZ DUAL HAN ÇOXHƏDLİLƏRİ VƏ RELYATİVİSTİK SİNQULYAR OSSİLYATOR MƏSƏLƏSİNİN DƏQİQ HƏLLİ

Ş.M.NAĞIYEV, E.İ.CƏFƏROV, R.M.İMANOV

Kəsilməz dual Han çoxhədliləri üçün sonlu-fərq tənliyinə baxılmışdır. Göstərilmişdir ki, bu tənlik müəyyən yanaşma tətbiq edilərək koordinat təsvirində relyativistik xətti sinqulyar ossilyator məsələsinin stasionar hallarını ifadə edən Şredinger tənliyininin sonlu-fərq analoquna çevrilir.

THE CONTINUOUS DUAL HAHN POLYNOMIALS AND EXACT SOLUTION OF THE RELATIVISTIC SINGULAR OSCILLATOR PROBLEM

S.M.NAGIYEV, E.I.JAFAROV, R.M.IMANOV

The finite-difference equation for the continuous dual Hahn polynomials has been considered. It has been shown that by applying certain method, this equation has been transformed to the finite-difference analogue of the Schrödinger equation, which described the stationary states of the relativistic linear singular oscillator in position representation.

Редактор: М.Бабаев

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЙ ПРОФИЛЬ КОМПОНЕНТОВ В МОНОКРИСТАЛЛАХ ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ InAs-GaAs ВЫРАЩЕННЫХ КОНСЕРВАТИВНЫМ МЕТОДОМ БРИДЖМЕНА

П.Г.АЖДАРОВ, М.А.АКПЕРОВ, В.К.КЯЗИМОВА, А.И.АЛЕКПЕРОВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 33

В пфанновском приближении выполнено математическое моделирование распределения компонентов в кристаллах твèрдых растворов InAs-GaAs, выращенных консервативным методом Бриджмена. С учèтом зависимости коэффициента сегрегации компонентов от состава расплава рассчитаны аксиальные концентрационные профили GaAs в кристаллах, выращенных из расплава с различным стартовым составом. Полученные результаты определяют возможности метода Бриджмена для выращивания кристаллов InAs-GaAs различного состава.

Актуальность работ направленных на исследование полупроводниковых твèрдых растворов связана с возможностью прецизионного управления электронными свойствами материала в широких пределах путèм изменения состава матрицы. Одним из перспективных материалов в ряду полупроводниковых твèрдых растворов является квазибинарная система $(InAs)_{1-x(}(GaAs)_x$. Составные компоненты этой алмазоподобной системы полностью растворяются друг в друге в любых соотношениях как в жидком, так и в твèрдом состояниях [1]. Существенное различие в ширинах запрещèнных зон составных компонентов этой системы (0.41эВ в InAs и 1.52эВ в GaAs) открывает возможность прецизионного управления величиной этого фундаментального параметра в кристаллах их твèрдых растворов путèм простого изменения их состава.

В настоящей работе проведено математическое моделирование распределения компонентов в монокристаллах твèрдых растворов InAs-GaAs, выращенных методом Бриджмена из расплава с различным исходным составом. Цель – установление возможностей метода Бриджмена для выращивания кристаллов $(InAs)_{1-x(}(GaAs)_x$ с заданным составом (x) и распределением компонентов. Заметим, что аналогичные задачи были решены ранее для классической системы кремний-германий в пфанновском приближении [2-7]. Результаты этих работ дали хорошее согласие с экспериментальными данными для кристаллов, выращенных из расплава как консервативными, так и неконсервативными методами.

Задачу аксиального распределения компонентов в кристаллах $(InAs)_{1-x(}(GaAs)_x$ решали в пфанновском приближении, при котором требуется выполнение следующих условий [8]: скорости диффузии молекул InAs и GaAs в расплаве достаточно высоки и обеспечивают равномерность его состава по всему объèму; диффузия компонентов в твèрдой фазе пренебрежимо мала; в расплаве отсутствует испарение и разложение компонентов; фронт кристаллизации плоский; на фронте кристаллизации существует равновесие между жидкой и твèрдой фазами, определяемое диаграммой фазового состояния системы. Очевидно, что выполнение большинства из перечисленных условий будет обеспечиваться при достаточно малых скоростях роста кристалла.

Введèм следующие обозначения: V_0, V_l – объèмы расплава в тигле в начальный и текущий моменты; V_c – объèм расплава, кристаллизирующийся в единицу времени; C_c, C_l – доля молекул (концентрация) GaAs в единице объèма кристалла и расплава соответственно; C_l^0 – доля молекул GaAs в расплаве в стартовой позиции кристаллизации; C – общее количество GaAs в расплаве; $к=C_c/C_l$ – равновесный коэффициент сегрегации GaAs. Учитывая принятые обозначения, имеем

$$C_l = \frac{C}{V_l} \quad \text{и} \quad \frac{dC_l}{dt} = \frac{\dot{C}V_l - \dot{V}_l C}{V_l^2}. \tag{1}$$

По условию задачи принимаем, что V_c постоянно и не зависит от времени. В этом случае параметры в (1) определяются уравнениями

$$V_l = V_0 - V_c t, \quad \dot{V}_l = -V_c, \quad \dot{C} = -V_c C_l k \quad . \tag{2}$$

Подставляя данные (2) в уравнение (1) после интегрирования получим

$$\frac{V_c t}{V_0} = \frac{l}{L_0} = 1 - \exp\left[-\int_{C_l}^{C_l^0} \frac{dC_l}{C_l k - C_l} \right], \tag{3}$$

здесь l - длина кристалла от стартовой позиции кристаллизации, L_0 – высота расплава до начала кристаллизации.

Решение интеграла в (3) требует знания аналитической зависимости коэффициента сегрегации k от C_l. По данным диаграммы фазового состояния системы InAs-GaAs коэффициент сегрегации второго компонента изменяется сложным образом с составом расплава в довольно широком диапазоне от значения ~20.3 при $C_l \to 0$ до 1 при $C_l \to 1$ и не поддаèтся аналитическому описанию. Однако, рассчитанные из диаграммы состояния значения k для различных C_l во всем интервале его изменения оказываются достаточными для определения значения интеграла в (3) графическим или численным методом. Взяв несколько значений C_l и соответствующих им k, начиная с момента кристаллизации расплава до момента времени t, строят график зависимости $1/[C_l(k-1)]$ от C_l. Интеграл в (3) численно равен площади под кривой, лежащей между ординатами C_l^0 и C_l. Определив графически нужные величины C_l, находим соответствующие l. Так как каждому значению состава расплава соответствует сопряжѐнное значение $C_c = C_l k$ можно построить график зависимости концентрационного распределения компонентов по длине кристалла. На Рис.1 приведены расчѐтные зависимости концентрации GaAs вдоль кристаллов твѐрдых растворов InAs-GaAs, выращенных из расплава с различными значениями стартового состава. Как видно, концентрация GaAs максимальна в начальной части слитков и уменьшается по его длине, стремясь к нулю в конце слитка.

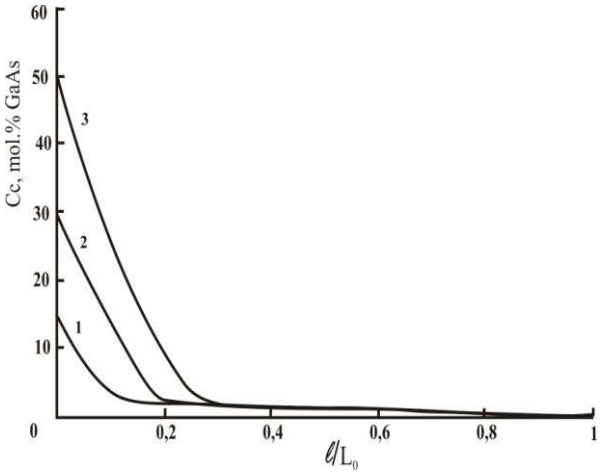


Рис.1.

Зависимости аксиальной концентрации GaAs в кристаллах твѐрдых растворов InAs-GaAs от l/L_0, выращенных методом Бриджмена. Кривые 1, 2 и 3 отвечают значениям C_1^0 в расплаве, равным 1, 2 и 3мол.%, соответственно).

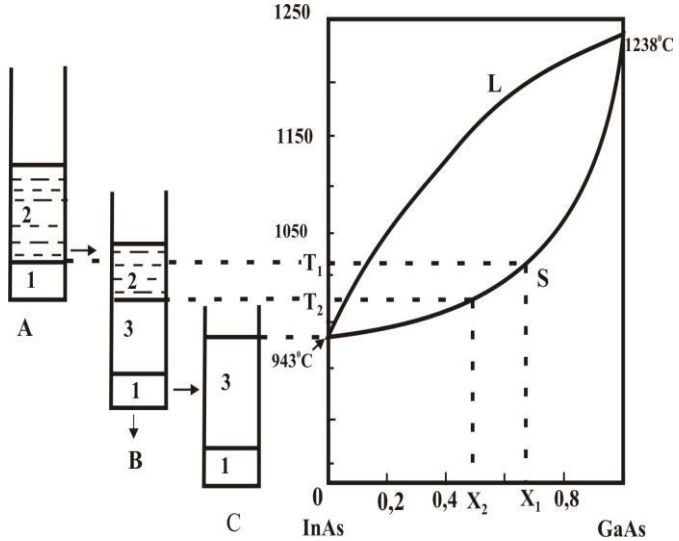


Рис.2.

Схема выращивания кристаллов InAs-GaAs методом Бриджмена и диаграмма фазового состояния этой системы [1]: 1, 2, 3 – затравка, расплав и кристалл, соответственно; А– стартовая позиция кристаллизации, В– промежуточная фаза кристаллизации; С– завершение кристаллизации расплава.

На Рис.2 представлена схема выращивания кристаллов InAs-GaAs методом Бриджмена и диаграмма фазового состояния этой системы, качественно поясняющая уменьшение концентрации второго компонента вдоль оси кристаллизации слитка. В стартовой позиции (А) доля молекул GaAs в кристалле $x=x_1$. С момента роста кристалла фронт кристаллизации с ростом t смещается в область низких температур, и доля молекул GaAs, согласно диаграмме состояния, уменьшается и стремится к нулю в конечной части слитка.

Как видно из Рис.1, концентрация GaAs в начальной части кристалла значительно превышает C_1^0 в связи с довольно большим значением коэффициента сегрегации этого компонента. Скорость уменьшения аксиальной концентрации этого компонента вдоль слитка для каждого случая зависит от величины C_1^0 . Семейство кривых на Рис.1 даѐт возможность определять нужные режимы получения кристаллов системы InAs-GaAs с требуемым составом и градиентом концентраций компонентов. Как следует из данных Рис.1 и Рис.2 метод Бриджмена может быть успешно использован для получения варизонных кристаллов системы InAs-GaAs с заданной скоростью изменения ширины запрещенной зоны вдоль полупроводникового материала. Очевидно, что при заданном количестве исходного расплава на скорость изменения состава вдоль кристаллов можно повлиять путѐм изменения диаметра растущих кристаллов.

Известно, что в практике в подавляющем большинстве случаев требуются кристаллы твѐрдых растворов с однородным распределением компонентов. Как видно из Рис.1 и Рис.2, традиционный метод Бриджмена не обеспечивает выращивания таких кристаллов для системы InAs-GaAs в связи с существенной сегрегацией компонентов. Для выращивания однородных кристаллов твѐрдых растворов этой системы требуется применение неконсервативных методов, обеспечивающих постоянство состава расплава в процессе его кристаллизации [8].

На основе вышеизложенного материала можно сделать следующее заключение. Моделирование аксиального распределения компонентов в кристаллах InAs-GaAs определяет возможности и оптимальные условия для получения материала с заданным составом и градиентом концентраций компонентов традиционным методом Бриджмена.

1. В.С.Земсков, В.Б.Лазарев, *Твёрдые растворы в полупроводниковых системах, М: Наука,* (1978) 197.
2. G.Kh.Azhdarov, T.Kucukomeroglu, A.Varilci et. al., *J. Crystal Growth,* **226** (2001) 437.
3. N.V.Abrosimov, S.N.Rossolenko, W.Thieme. et. al., *J. Crystal Growth*, **174** (1997) 182.
4. П.Г.Аждаров, Н.А.Агаев, *Неорганические материалы*, **35** (1999) 763.
5. З.М.Захрабекова, З.М.Зейналов, В.К.Кязимова, Г.Х.Аждаров, *Неорганические материалы,* **43** (2007) 5.
6. V.K.Kyazimova, Z.M.Zeynalov, Z.M.Zakhrabekova, G.Kh.Azhdarov, Crystallography Reports, **1** (2006) 192.
7. T.A.Campbell, M.Schweizer, P.Dold et. al., *J. Crystal Growth*, **226** (2001) 231.
8. В.М.Глазов, В.С.Земсков, *Физико-химические основы легирования полупроводников, М.: Наука*, (1967) 371.
9. J.Schilz, V.N.Romanenko, *J. Material Science: Materials in Electronics*. 6 (1995) 265.

KONSERVATIV BRICMEN ÜSULU ILƏ ALINAN InAs-GaAs BƏRK MƏHLUL MONOKRİSTALLARINDA KOMPONENTLƏRİN KONSENTRASİYON PROFİLİ

P.G.ƏJDƏROV, M.Ə.ƏKPƏROV, V.K.KYAZIMOVA, Ə.İ.ƏLƏKPƏROV

Konservativ Bricmen üsulu ilə alınan InAs-GaAs bərk məhlul kristallarında komponentlərin paylanmasının Pfann yaxınlaşmasında riyazı modelləşdirilməsi aparılıb. Komponentlərin seqreqasiya əmsallarının ərintinin tərkibindən asılılığını nəzərə almaqla, ərintinin müxtəlif başlanğıc tərkiblərindən alınan kristallarda GaAs komponentinin konsentrasiyon paylanması hesablanıb. Alınan nəticələr müxtəlif tərkibli InAs-GaAs kristallarının alınmasında Bricmen üsulunun imkanlarını təyin edir.

THE COMPONENTS DISTRIBUTION PROFILE IN InAs-GaAs MIXED SINGLE CRYSTALS GROWN BY CONSERVATIVE BRIDGMAN METHOD

P.G.AZHDAROV, M.A.AKPEROV, V.K.KYAZIMOVA, A.I.ALEKPEROV

The mathematical modeling of the components distribution in InAs-GaAs solid solutions crystals grown by the conventional Bridgman method has been carried out in Pfann approximation. GaAs concentration profiles along the ingots grown from the melt with various starting composition have been calculated taking into account dependence of the segregation coefficient of the components on the melt composition. Obtained results have defined the potential of the Bridgman method for growing compositionally graded InAs-GaAs crystals from the melt.

Редактор: Д.Араслы

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ В ГАММА ОБЛУЧЕННЫХ КРИСТАЛЛОВ InP<Fe>

М.И.АЛИЕВ, Ш.Ш.РАШИДОВА, М.А.ГУСЕЙНОВА, И.М.АЛИЕВ, Н.Н.ГАДЖИЕВА*

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33
*Институт Радиационных Проблем НАН Азербайджана**
AZ 1143, г.Баку, ул. Ф.Агаева, 9

Исследованы спектры пропускания монокристаллов InP<Fe> облученных гамма- квантами дозой 10кГр. Обнаружено, что при облучении появляются новые полосы поглощения с энергиями активации E_a=0.37эВ и 0.24эВ.

Легированный железом фосфид индия является перспективным материалом для создания быстродействующих интегральных схем, приборов СВЧ диапазона, источников и детекторов излучения для устройств волоконной оптики [1].

В качестве внешних воздействий, создающих дефекты разного типа, в кристаллах A^3B^5 используют облучение электронами, ионами, рентгеновское и гамма облучение. Относительно малое число работ посвящено изучению оптических свойств гамма индуцированных состояний в InP и InP<Fe>. Поэтому представляет интерес исследование оптического поглощения облученных гамма-квантами монокристаллов InP, легированных железом. Особенно важным является изучение глубоких центров, связанных со специально-вводимыми при выращивании монокристаллов примесями и антиструктурными дефектами.

В данной работе представлены результаты экспериментальных исследований по дефектообразованию в кристаллах InP<Fe>, облученных гамма-квантами. В работе использовались выращенные методом Чохральского образцы InP, легированные железом. Образцы представляли собой пластинки размером 20x1,2мм^2 и толщиной 400мкм. С целью исключения примесных загрязнений пластинки обрабатывались этиловым спиртом и высушивались при комнатной температуре в среде аргона. Затем для полной очистки от органических загрязнений и дегидрооксилирования поверхности образцы помещались в кварцевые ячейки и дополнительно вакуумировались при давлении P=10^{-5}Па в течение 6 часов по методике описанной в [2].

Образцы облучали гамма квантами на изотопном источнике Co^{60} при мощности дозы 1,03Гр/с при комнатной температуре. Дозиметрию проводили ферросульфатным методом, а поглощенную дозу(Дγ) рассчитывали с учетом электронных плотностей исследуемой системы и дозиметрического раствора. Поглощенная доза составляла $Д_\gamma$=10кГр.

ИК спектры пропускания измеряли на спектрофотометре Specord 71-IR(Carl Zeiss) в области частот 4600÷650см$^{-1}$ при комнатной температуре с помощью специально разработанной ячейки с окнами из CaF_2. Спектры отражения измерялись линейно-поляризованным излучением. Угол падения был близким к скользящему ($\varphi=88^0$). Измерения проводилось с помощью специального отражательного устройства Shimadzu, Япония.

На Рис.1 показаны спектры пропускания исходного (кр.1) и облученного дозой 10кГр (кр.2) образцов InP<Fe>. Как видно из рисунка, облучение приводит к уменьшению коэффициента пропускания, что связано с образованием радиационных дефектов, при этом ухудшается и отражательная способность этих материалов.

Из рис.1 также видно, что при облучении монокристаллов фосфида индия, легированных железом, имеет место смещение некоторых уровней, а также исчезновение уровней с энергией 0.15 и 0.12эВ.

При легировании акцепторными примесями уровень Ферми уходит в валентную зону и при последующем высокоэнергетическом облучении смещается (возвращается) в положение $F_{lim}=E_v+1.0$эВ, т.е. закрепляется в пределах разрешенной валентной зоны. Это способствует формированию материала р-типа проводимости за счет введения радиационных дефектов. В зависимости от особенностей энергетического спектра полупроводника уровень $F_{lim} \cong (\frac{<Eg>}{2})$ может оказаться выше середины минимальной запрещенной зоны Eg/2InP, и это определяет тип проводимости и электрофизические свойства облученного материала [3].

Спектр пропускания исходного образца InP<Fe> характеризуется наличием ряда полос поглощения уровней E_1-E_8 с энергиями активации 0.59, 0.44, 0.28,0.26,0.2, 0.15, 0.12, 0.1, соответственно. Облучение кристалла InP<Fe> дозой 10кГр приводит к изменению спектра, так как полосы поглощения уровней E=0.26, 0.15 и 0.12эВ исчезают, интенсивность полосы поглощения E=0.2эВ увеличивается. Последнее указывает на увеличение концентрации дефекта. При этом появляются новые полосы поглощения с энергиями активации E=0.37 и 0.24эВ.

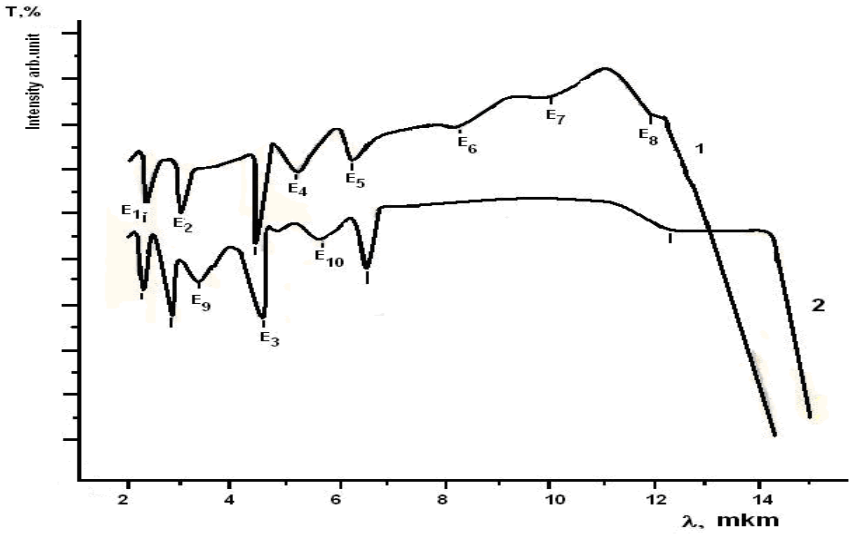


Рис.1.

Спектры пропускания кристаллов InP<Fe> до (кр.1) и после гамма-облучения (кр.2) дозой 10 кГр.

Авторами работы [4] изучалось влияние примесей и радиационно-стимулированных дефектов, вызванных электронным облучением (1МэВ) на энергетический спектр InP<Fe>. Основной центр дефекта дырочной ловушки с энергией 0.37эВ в p-InP, которая должна обусловливать точечный дефект, отжигается при комнатной температуре. Показано, что дефекты, вызванные радиацией в InP должны восстанавливаться через дальнодействующую диффузию, которая создается примесными атомами. Была предложена модель, в которой точечные дефекты диффундируют через примеси так, что исчезают или связываются и образуют точечные комплексы дефект-примесь.

Содержание индия и железа увеличивает концентрацию собственных доноров. Так как железо является глубоким акцептором доноров, который замещает индий в InP, облучение монокристаллов вводит комплекс состоящий из атома железа и связанной вакансии (фосфор). По-видимому, уровни E_9 и E_{10} связаны с переходами между центрами ионов железа. Способность атомов железа взаимодействовать с дефектами в решетке InP приводит к образованию активных центров, в том числе, их компенсирующих. Возможно при этом создаются комплексы, содержащие антиструктурные дефекты In_P и атомов железа.

Из Рис. 1 видно, что дефект с энергией активации E_3=0.28эВ является радиационно стойким дефектом. Этот уровень лежит выше валентной зоны E_v+0.28эВ и связан с фотоионизицией этого уровня в InP<Fe> [5].

При гамма облучении монокристаллов InP<Fe> возрастает коцентрация дефектов с энергиями E_5 и E_8.

ВЫВОДЫ

Облучение монокристаллов InP<Fe> гамма-квантами со сравнительно малыми дозами (Д=10кГр.) приводит к ухудшению поверхностного состояния этого материала.

Установлено, что собственный дефект образующий энергетический уровень H_2(Ea=0.28эВ) акцепторного типа является радиационно-стойким.

Показано, что при гамма облучении уменьшается концентрация дефектов, образующих энергетические состояния E_4 (0.26эВ). Исчезают дефекты, создающие энергетические состояния E_6=0.15 и E_7=0.12эВ, при этом образуются новые радиационно стимулированные дефекты, приводящие к созданию энергетических уровней E_9=0.37 и E_{10}=0.24эВ.

1. V.P.Saveliev, M.A.Pogarsky, V.N.Romanov, A.E.Vasiliev, S.A.Staravoitov, Proc. SPIE**, 99** (2002) 4627.
2. Н.Н.Гаджиева, *Журнал прикладной спектраскопии*, **72** (2005) 440.
3. В.Н.Брудный, Н.Г. Колин, Л.С.Смирнов, *ФТП,* **41** (2007) 1031.
4. Masafuni Yamaquchi and Koshi Ando, *Journal of Applied Physics*, **60** (1986) 935.
5. S.T.Pantelides, *Science*, (1992) 928.

QAMMA ŞÜALARI ILƏ ŞÜALANAN DƏMIRLƏ LEGIRƏ OLUNMUŞ INDIUM FOSFID KRISTALINDA DEFEKTƏMƏLƏGƏLMƏ

M.İ.ƏLIYEV, Ş.Ş.RƏŞIDOVA, M.A.HÜSEYNOVA, İ.M.ƏLIYEV, N.N.HACIYEVA

Dozası 10kQr olan qamma kvantlarla şüalandırılmış InP<Fe> monokristallarının buraxma spektrləri tədqiq edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, şüalanma nəticəsində aktivasiya enerjisi 0.37 və 0.24eV olan yeni uddulma zolaqları yaranır.

FORMATION OF DEFECTS IN IRON-DOPED INDIUM PHOSPHIDE IRRADIATED BY Γ-QUANTA

M.I.ALIEV, Sh.Sh.RASHIDOVA, M.A.GUSEYNOVA, I.M.ALIEV, N.N.QAJIEVA

Transmittance spectra in InP<Fe> single crystals irradiated by with the dose of 10kGr at temperature 300K have been investigated. It has been revealed that after irradiation new absorption bands with activation energies of 0.37 and 0.24eV appear.

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ТЕРМОЭЛЕМЕНТЫ ДЛЯ ЭЛЕКТРОГЕНЕРАТОРОВ НА ОСНОВЕ ХАЛЬКОГЕНИДОВ ВИСМУТА И СУРЬМЫ С МЕЖСЛОЕВЫМИ НАНОСТРУКТУРАМИ

Ф.К.АЛЕСКЕРОВ[1], С.Б.БАГИРОВ[2], С.Ш.КАХРАМАНОВ[1], Г.КАВЕИ[3]

НПО "Селен" НАН Азербайджана[1]
AZ 1143, Баку, Пр.Г.Джавида 29А
Институт Физики НАН Азербайджана[2]
AZ 1143, Баку, пр.Г.Джавида 33
Научный центр - Материалы и энергия ALVANOST[3]
Иран, г.Карадж

Получены высокоэффективные термоэлектрические материалы *n*- и *p*- типов с внутрислоевыми нанообъектами для термоэлектрогенераторов с рабочим интервалом до 600*K*. Показано, что в твердых растворах *n*-типа (Bi_2Te_3-Bi_2Se_3)<$CdCl_2$+ Se> и *p*- типа (Sb_2Te_3-Bi_2Te_3)<Se> внутрислоевые наноструктурные элементы стабильны до 700*K* и способствуют увеличению параметра мощности $\alpha^2\sigma$. Использование электронных и дырочных ветвей таких термоэлементов для создания термоэлектрогенераторов позволило увеличить удельную мощность на 15%.

ВВЕДЕНИЕ

Данная статья посвящена проблеме получения термоэлектрических кристаллов $Sb_2Te_3(Bi_2Te_3)$ с наночастицами в пространстве между слоями $Te^{(1)}-Te^{(1)}$. По существу, сами слоистые соединения способны "пленять" молекулы гостей в процессе синтеза, а также при интеркалировании. При этом, в первую очередь, были решены следующие задачи: во-первых, насколько ван-дер-ваальсову щель $T_e^{(1)}-T_e^{(1)}$ в Bi_2Te_3 и Sb_2Te_3 можно рассматривать как нанореактор для примесей и, во-вторых, какова морфология примесных слоев, образующихся в межслоях на поверхности (0001) и какие изменения в термоэлектрические свойства кристаллов вносят наночастицы.

Поиск путей практического использования материалов наноразмерных структур применительно к нуждам термоэлектрического преобразования энергии пока не выходит за пределы чисто научных обсуждений [1].

Возрастание интереса к исследованиям наноструктурированных материалов на основе Bi_2Te_3, Bi_2Se_3 и Sb_2Te_3 обусловлено особенностями их фазового и структурного состояния, а также практически важными физико-химическими свойствами, которые не свойственны макроскопическим объектам. Поэтому получение новых наноматериалов на основе легированных монокристаллов халькогенидов *Bi* и *Sb* и исследование их свойств является актуальной задачей.

Процессы образования межслоевых наноразмерных структур примесей на ван-дер-ваальсовых поверхностях (0001) слоистых кристаллов (Bi_2Te_3-Bi_2Se_3)<$Se,CdCl_2$> и (Sb_2Te_3-Bi_2Te_3)<Se> до настоящего времени подробно не изучены. Ниже приведены результаты исследования морфологических характеристик межслоевых наноструктур селена, формированных на поверхности (0001) материалов для электрогенерирования методами рентгендифрактометрии и электронной микроскопии.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Легированные твердые растворы получали термическим синтезом при 900÷950*K*, который проводили в кварцевых ампулах, куда загружали *Bi, Te, Sb* и примеси добавки Se (3вес%). После синтеза сплавов их погружали в графитизированные и вакумированные ампулы, заново сплавляли и, далее, вертикальной направленной кристаллизацией получали сплавы, имеющие

межслоевые нанообъекты при градиенте температуры $\Delta\ T=100$град/см (при температуре плавления 900*K* и скорости кристаллизации 1см/час).

Для исследований выбирались кристаллы с *n*- и *p*- типами проводимости, выращенные с добавками сверхстехиометрического селена. Скалывание вдоль базисной плоскости осуществляли непосредственно перед экспериментом. Из-за наличия слоистой структуры такие кристаллы легко скалываются по плоскости (0001), называемой плоскостью спайности. Исследуемые кристаллы раскалывали процарапав сначала канавку параллельно плоскости спайности, а затем резко, но не сильно стукнув его с обратной стороны; при этом предварительно в эту канавку было введено лезвие специального ножа.

Электронно-микроскопические изображения получали на атомно-силовом микроскопе (АСМ) марки NC-AFM, который позволял получать трехмерное изображение поверхности (0001) кристаллов.

Рентгендифрактометрические исследования проводились на установке марки Philips Panalytical (X-ray difractometer). Электрические параметры измеряли компенсационным методом.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В нанореакторах между слоями на легированных *Se* твердых растворах кристаллов Bi_2Te_3, Sb_2Te_3 и Bi_2Se_3 может происходить формирование наночастиц металлов и полупроводников. Большой интерес представляет их заполнение селеном с целью получения межслоевых нанофрагментов при одновременной оптимизации термоэлектрических параметров мощности $\alpha^2\sigma$ (здесь α -термоэдс, σ -электропроводность) [2]. Наноконтейнер не просто формирует нанофрагмент («пирамиды роста»), но и предохраняет его от окисления и разрушающего действия разных сред. Такие нанообъекты с позиции высоких технологий являются предметом усиленного изучения.

На Рис.1 и Рис.2 представлены АСМ-изображения в 3Д масштабе для состава *n*-(96моль%Bi_2Te_3-$Bi2Se_3$4моль%)<*Se*> и *p*-($Sb_2Te_3$75mol%-Bi_2Se_3 5mol%)<*Se*>, соответственно. В обоих случаях вводился избыток 3% весовых селена. Рентгендифрактометрические снимки показали наличие селена на поверхности (0001) обоих типов кристаллов.

Показано, что ван-дер-ваальсова щель - это своеобразный нанореактор, где произошло зарождение квазидвумерных слоев с наноостровкам между $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$ на поверхности (0001) Bi_2Te_3<*Se*> и Sb_2Te_3<*Se*>. Для обоих типов кристаллов помимо АСМ-изображений поверхности (0001) в 3Д масштабе исследованы функции распределения наночастиц с одинаковыми размерами (Фурье-спектры), плотность распределения по высоте (гистограммы). Гистограмма для *p*-типа дана на Рис.3, размер по высоте колеблется в пределах 10÷30нм. Аналогичные размеры получаются и для *n*-Bi_2Te_3. Сформированные между $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$ Bi_2Te_3 нанофрагменты как в нанореакторах, открывают широкие возможности для дизайна нанокомпозитов с высокими термоэлектрическими параметрами.

В последние годы высказаны предположения, связанные с тем, что теоретические оценки не учитывают многих существенных особенностей термоэлектрических преобразователей (ТЕП), создаваемых на основе нанообъектов (НО).

Полученный экспериментальный материал свидетельствует о том, что НО характеризуются наличием больших неоднородностей в распределении внутренних механических напряжений, формирующих как межатомные расстояния в кристаллических решетках соответствующих наноэлементов, так и

высокоградиентное распределение химического состава в их пространственно-ограниченном объеме. В свете сказанного следует отметить, что разработка специализированных подходов, предназначенных для надежного описания НО, остается настоятельным требованием времени.

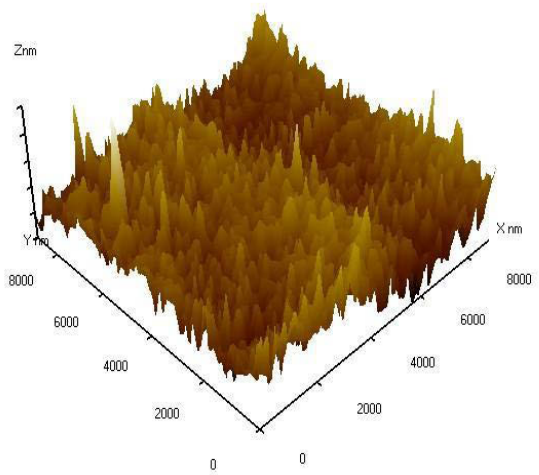


Рис.1.
АСМ-изображение поверхности (0001) кристаллов р-типа.

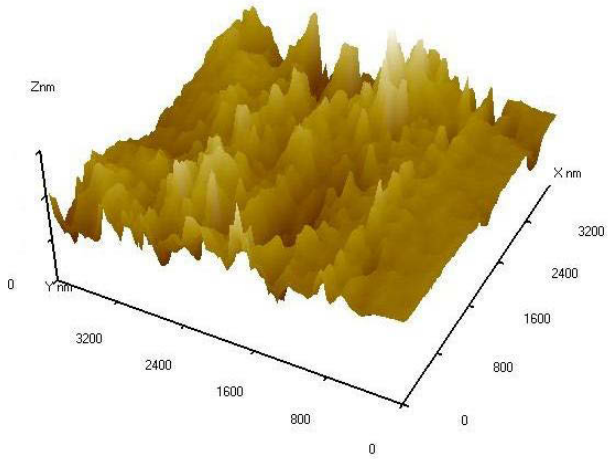
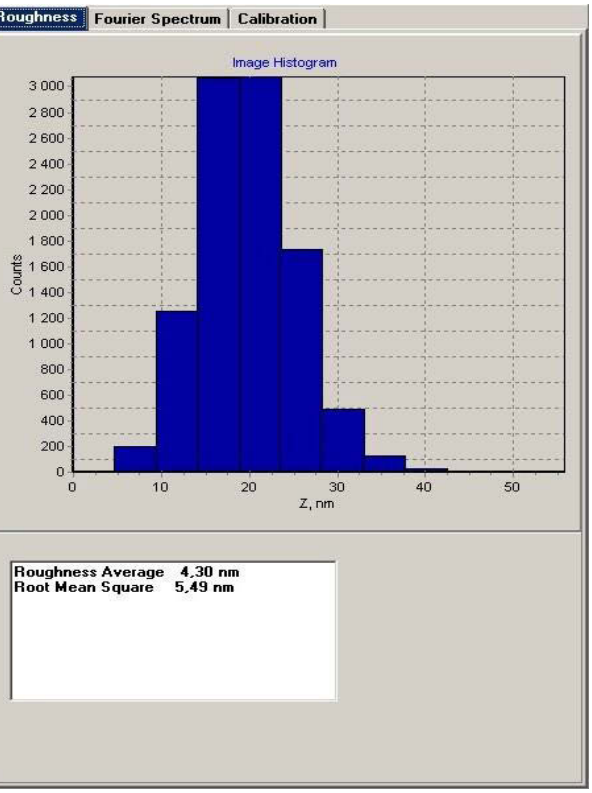


Рис.2.
АСМ-изображение наночастиц избыточного селена поверхности (0001) (Bi_2Te_3-Bi_2Se_3).



Характерные значения термоэдс и электропроводности твердых растворов *p*-типа *(Sb_2Te_3-Bi_2Se_3)<Se>* приведены ниже

$$\alpha = 183 \cdot \frac{мкv}{K} \quad \sigma = 1800 \cdot Ом^{-1} \cdot см^{-1}.$$

Для $n-(Bi_2Te_3-Bi_2Se_3)<CdCl_2+Se>$ параметры эти следующие

$$\alpha = -190\frac{мкv}{K}; \sigma = 1500\, Ом^{-1} \cdot См^{-1}; \alpha^2\sigma = 54{,}1 \cdot 10^6\, мкВт/(см \cdot K^2)\,.$$

Средняя термоэлектрическая эффективность образцов *p*-типа с селеновыми нановключениями в интервале температур 300÷600*K* составляла $Z_{cp} \approx 2{,}5 \cdot 10^{-3} K^{-1}$; образцы *n*-типа имели $Z_{cp} \approx 2{,}3 \cdot 10^{-3} K^{-1}$. Параметры эти даны для T=300K

Рис.3
Функция распределения нанофрагментов на поверхности (0001) (Sb_2Te_3-Bi_2Te_3)<Se>-(гистограмма).

ВЫВОДЫ

Избыток селена в значительной мере компенсирует антиструктурные дефекты. Отжиг при температуре 600К уменьшает параметры электропроводности также, как и при избытке *Te* [1]. Этот эффект обусловлен избыточным селеном, при-сутствующим в виде нановключений в пространстве между $T_e^{(1)} - T_e^{(1)}$ в образцах *n- и p*-типов проводимости. В выбранной паре ветвей термоэлементов параметры по σ более или менее согласованы; высокие значения $\alpha^2\sigma$ позволили увеличить мощность термоэлемента более чем на 15%. Термоэлектрическая эффективность полученных образцов в интервале температур до 400К совпала с данными работы [2].

1. П.И.Баранский, Г.П.Гайдар, Ж. Термоэлектричество, (Украина) **2** (2007) 47.
2. Л.Д.Иванова, Л.И.Петрова, Ю.В.Гранаткина, В.С.Земсков, Неорганические материалы, **43** (2007) 1044.

ELEKTROGENERATORLAR ÜÇÜN BISMUT VƏ SÜRMƏ HALKOGENIDLƏRIN ƏSASINDA LAYLAR ARASINDA NANOSTRUKTURLU TERMOELEMENTLƏR

F.K.ƏLƏSKEROV, S.B.BAĞIROV, S.Ş.GƏHRAMANOV, Q.KAVEI

600K qədər işləyə bilən termogeneratorlar üçün, laylar arasında nanoobyektləri olan yüksəkeffetiv “n” və “p” tip termoelektrik materialları alınıb.

n–tip (Bi_2Te_3-Bi_2Se_3)<$CdCl_2$+Se> və p-tip (Sb_2Te_3-Bi_2Te_3)<Se> bərk məhlullarında laylararası nanostruktur elementrlərinin 700K qədər stabil olmağı və bunun nəticəsində güc parametrini artmağı göstərilmışdir.

Belə elektron və deşik keçiricikli budağı olan termoelementlərin яsasında düzəldilmiş termoelektrogeneratorlarда xüsusi gucun 15% artması göstərilmişdir.

THERMOELEMENTS FOR ELECTRIC GENERATORS ON *Bi* AND *Sb* BASED CHALCOGENIDES WITH INTRALAYER NANOSTRUCTURES

F.K.ALESKEROV, S.B.BAGIROV, S.Sh.KAKHRAMANOV, Q. KAVEI

The high-effective thermoelectric materials of n- and p- types interlayer nanoobjects for thermoelectric generators at temperature range up to 600K have been obtained.

It has been shown that in solid solutions of n– type (Bi_2Te_3-Bi_2Se_3)<$CdCl_2$+Se> and p- type (Sb_2Te_3-Bi_2Te_3)<Se> intralayer nanostructural elements have been stable up to 700K and have favourtd the increase of power parameter $\alpha^2\sigma$. Use of electron and hole branches of thermal elements for creation of thermoelectric generators allow specific power by 15% to be increased.

Редактор: Дж.Абдинов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ДИАГРАММА СОСТОЯНИЯ СИСТЕМ TlS – FeS, TlSe – FeSe И О МАГНИТНЫХ СВОЙСТВАХ СОЕДИНЕНИЙ $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$

Р.Г.ВЕЛИЕВ, Э.М.КЕРИМОВА, Ф.М.СЕИДОВ, Р.З.САДЫХОВ, Н.З.ГАСАНОВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ-1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33

Методом дифференциально-термического анализа были изучены фазовые равновесия в системах TlS–FeS и TlSe–FeSe, в которых были обнаружены конгруэнтно плавящиеся соединения $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ с температурами плавления, равными соответственно 930К и 875К. Анализ опубликованных работ по магнитным свойствам $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ позволил заключить, что эти соединения являются сильноанизотропными-квазиодномерными антиферромагнетиками.

В литературе, наряду со структурными исследованиями [1-4], имеется некоторое количество экспериментальных работ по магнитным свойствам соединений $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ [5-8]. Однако выводы о характере магнитного обменного взаимодействия в них достаточно противоречивы. Чтобы однозначно быть уверенными в своих суждениях о природе магнитного фазового перехода в соединениях $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$, надо прежде всего убедиться в конгруэнтном (устойчивом) характере плавления $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$, ибо в случае химической неустойчивости этих соединений оставались бы сомнения в правильности проделанного нами анализа магнитного обменного взаимодействия в них.

Методом дифференциально-термического анализа (ДТА) были изучены фазовые равновесия в системах TlS(Se)–FeS(Se). Исходные соединения TlS, FeS и TlSe, FeSe синтезировали в вакуумированных до остаточного давления $\sim 10^{-3}$Па кварцевых ампулах прямым сплавлением химических элементов высокой чистоты (Tl–99,999%; Fe–99,999%; S–99,9999%; Se–99,9999%), взвешенных в стехиометрическом соотношении. Вакуумированные кварцевые ампулы с составами помещались в электропечь, и режим синтеза сплавов выбирали, основываясь на температурах плавления исходных бинарных соединений. Каждый сплав нагревали выше температуры плавления исходных бинарных соединений и выдерживали при этой температуре в течение 6-9 часов, после чего температуру печи понижали до комнатной со скоростью 100К/час. Синтезированные сплавы приводили в порошкообразное состояние, спрессовывали и в вакуумированных кварцевых ампулах для гомогенизации отжигали в электропечи при температуре ~750К в течение 600 часов. Отожженные образцы исследовались на низкочастотном термографическом регистраторе НТР-64, позволяющем фиксировать температуры фазовых превращений с точностью ±5К. Температуру контролировали Pt-Pt/Rh термопарой, проградуированной по реперным элементам в интервале 430÷1560К.

Построенная по результатам ДТА часть диаграммы состояния системы TlS–FeS (50-100мол% FeS) представлена на Рис.1. При соотношении компонентов TlS:FeS=1:1 образуется конгруэнтно плавящееся химическое соединение $TlFeS_2$ с температурой плавления 930К. Из рисунка видно, что между $TlFeS_2$ и FeS образуется простая эвтектика, содержащая 61мол% FeS и плавящаяся при 875К.

Для построения диаграммы состояния системы TlSe–FeSe было приготовлено 14 образцов. Сплавы составов $(TlSe)_x(FeSe)_{1-x}$ синтезировали в кварцевых ампулах, вакуумированных до остаточного давления $\sim 10^{-3}$Па. Режим синтеза сплавов выбирали, основываясь на температурах плавления исходных бинарных соединений – 600К для TlSe и 1290К для FeSe. Каждый сплав нагревали выше температуры плавления исходных бинарных соединений и выдерживали при этой температуре в течение 5-6 часов, затем температуру печи понижали до комнатной со скоростью 100К/час. Полученные сплавы приводили в порошкообразное

состояние, спрессовывали и в вакуумированных кварцевых ампулах для гомогенизации отжигали в электропечи в течение 480 часов при температуре ~400К в случае сплавов, богатых TlSe и в течение 550 часов при температуре ~700К в случае сплавов, богатых FeSe. После этого отожженные образцы исследовались на установке НТР-64.

Построенная по результатам ДТА диаграмма состояния системы TlSe–FeSe представлена на Рис.2. Из рисунка видно, что при соотношении бинарных компонентов 1:1 образуется соединение $TlFeSe_2$ с конгруэнтным плавлением при температуре 875К. Область гомогенности для данного соединения отсутствует. На основе TlSe образуется широкая область твердых растворов (до 25мол% FeSe при 300К). Нонвариантная перитектическая точка отвечает составу $(TlSe)_{0,7}(FeSe)_{0,3}$ и температуре 675К. Между $TlFeSe_2$ и FeSe образуется эвтектика состава $(TlSe)_{0,44}(FeSe)_{0,56}$, плавящаяся при температуре 825К.

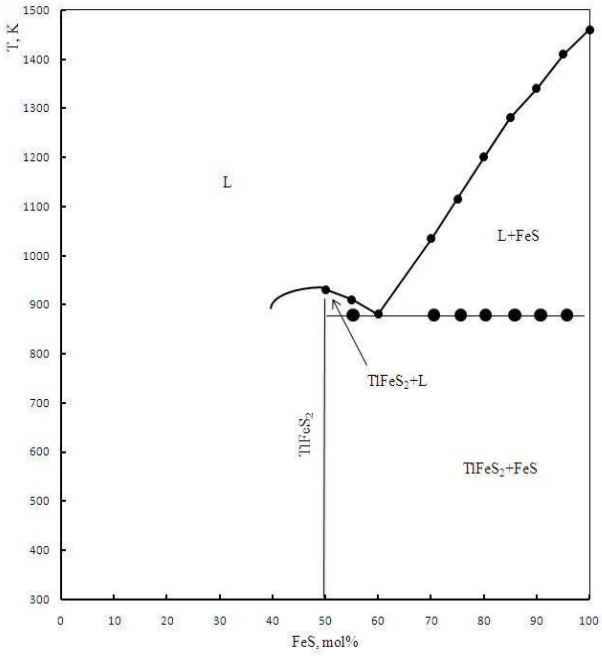


Рис.1.
Диаграмма состояния системы TlS–FeS.

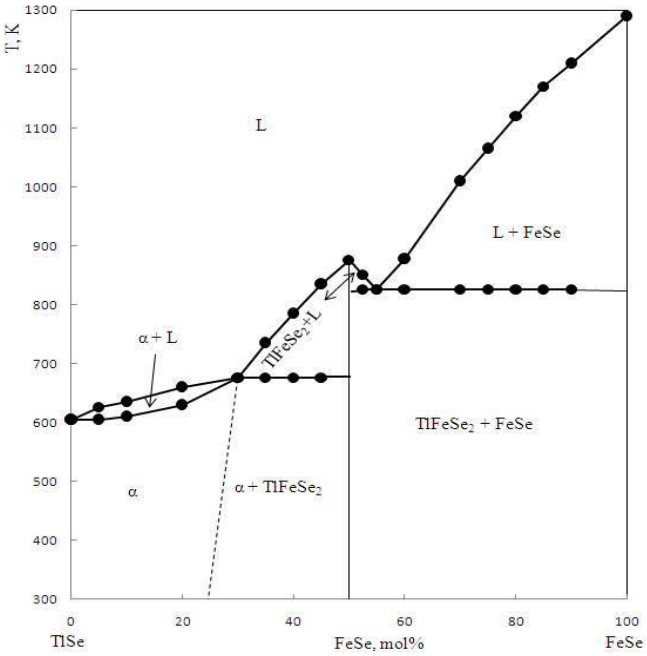


Рис.2.
Диаграмма состояния системы TlSe–FeSe.

Конгруэнтно плавящиеся соединения $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ обладают моноклинной структурой, в которой имеются цепочечные построения (β-модификация, пространственная группа симметрии C2/m – C_{2h}^3) [2-4]. В сильноанизотропных (слоистых, цепочечных) магнетиках при исследовании их магнитных свойств экспериментально обнаруживаются особенности, вытекающие из модели Изинга-Гейзенберга [9]. Эти особенности могут наблюдаться только в магнетиках, кристаллическая структура которых низкосимметрична, при этом кристаллохимическая формула таких магнетиков должна содержать как минимум три атома.

Низкосимметричность кристаллической структуры магнитных соединений типа $TlMeX_2$, (где Me=3d-металл; X=S, Se, Te) [1-4, 10, 11] предопределяет зависимость их магнитных свойств от основных кристаллографических направлений, в некоторых случаях (структура содержит плоскостные или цепочечные построения) – вплоть до возникновения низкоразмерного эффекта, когда спиновая система (магнитная структура) магнетика в парамагнитной области в определенном температурном интервале находится в квазидвумерном или квазиодномерном магнитном упорядочении (модель Изинга-Гейзенберга) [9]. По

этой модели поведение низкоразмерных спиновых систем в области высоких температур (парамагнитная область) в окрестности фазового перехода и в области низких температур имеет специфические особенности, резко отличающиеся от поведения их трехмерных спиновых систем. Например, температурная зависимость магнитной восприимчи-вости низкомерного антиферромагнетика в парамагнитной области при $T \gg T_N$ (T_N - температура Нееля) характеризуется наличием широкого максимума, который связан с сильно развитым ближним магнитным порядком. Кроме того, на температурной зависимости теплоемкости низкомерных магнетиков наблюдается аномалия с явным отклонением от λ–типа [6,9,12,13].

В статье [5] в интервале температур 1,5÷400К методом Фарадея была исследована температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ соединений $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$. Зависимость $\chi^{-1}(T)$ исследовалась как в произвольном кристаллографическом направлении, так и в направлениях основных кристаллографических осей ($\vec{c}$ и $\vec{a}$).

На Рис.3 представлена температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$ (рисунок с нашими комментариями соответствует публикации [5].) Как видно из рисунка, магнитные свойства $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$ существенно зависят от кристаллографического направления. Авторы работы [5] принимают широкий минимум, имеющийся на зависимости $\chi^{-1}(T)$ при температурах ~196К ($TlFeS_2$) и ~290К ($TlFeSe_2$), за температуру Нееля T_N, характеризующую дальний магнитный порядок. Выше этих температур, как считают авторы [5], формируется квазиодномерное антиферромагнитное упорядочение в магнитной структуре соединений $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$. По нашему мнению для однозначной интерпретации полученных в [5] экспериментальных результатов исследователи должны были учесть, что спиновая система (магнитная структура) магнетика формируется его кристаллической структурой.

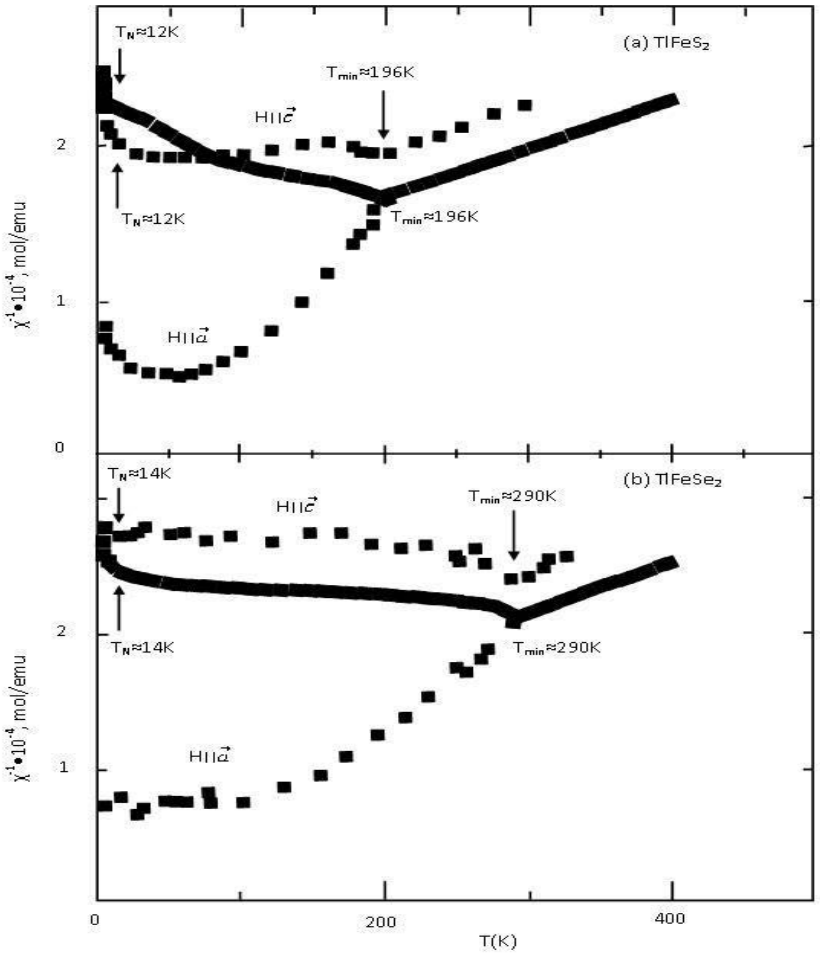


Рис.3.
Температурная зависимость обратной магнитной восприимчивости $TlFeS_2$(a), $TlFeSe_2$(b). (Рисунок с нашими комментариями соответствует публикации [5].)

Соединения $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ обладают моноклинной структурой, в которой имеются цепочечные построения из тетраэдров FeX_4 (X – халькоген) с общими ребрами [2-4]. В центре тетраэдров находятся ионы железа Fe^{3+} , а в вершинах расположены ионы халькогена S^{2-} или Se^{2-} (Рис.4). Ионы таллия Tl^{1+} находятся в призматических пустотах кристаллической структуры $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$. Тетраэдры

FeX_4 соединены в линейные цепи и параллельны кристаллографической (базисной) оси $\vec{c}$. Обменное магнитное взаимодействие между ионами железа вдоль цепи тетраэдров осуществляется по цепочке атомов –Fe-X-Fe-, образующих определенный угол. Обменное взаимодействие между ионами железа в направлении кристаллографической (базисной) оси $\vec{a}$, перпендикулярной цепи тетраэдров FeX_4 будет осуществляться по цепочке атомов –Fe-X-Tl-X-Fe-. Известно, что если два магнитных иона разделены двумя анионами, то энергия такого катион-анион-анион-катионного взаимодействия на порядок меньше энергии катион-анион-катионного взаимодействия [14]. Из этого следует, что энергия «сверхобмена» по цепочке –Fe-X-Tl-X-Fe- должна быть на два порядка величины меньше энергии взаимодействия –Fe-X-Fe-, имеющего место вдоль цепи тетраэдров. Тогда можно предположить, что магнитные свойства соединений $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ будут определяться, главным образом, обменным взаимодействием между ионами железа, расположенными внутри цепочки тетраэдров, которая параллельна кристаллографической оси $\vec{c}$, т.е. в этом направлении соединения $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$ можно рассматривать как квазиодномерные магнитные системы.

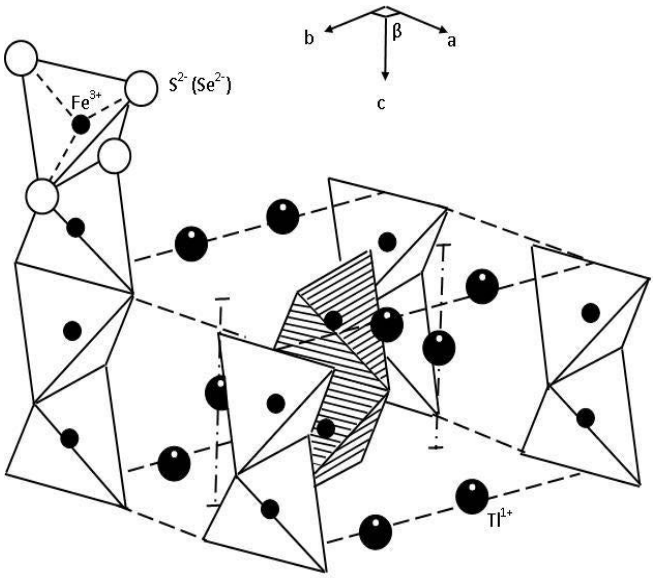


Рис.4.

Кристаллическая структура соединений $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$ (β-модификация, ПГС C2/m – C_{2h}^3).

Авторы работы [5] на зависимостях $\chi^{-1}(T)$ для $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ (Рис.3), измеренных как в произвольном кристаллографическом направлении (сплошные квадратики), так и в направлении оси $\vec{c}$, не заметили при температурах соответственно ~12K и ~14K аномалий, указывающих на трехмерный антиферромагнитный переход (дальний магнитный порядок). Температуры Нееля, определенные в [6] из температурной зависимости магнитной восприимчивости $\chi(T)$ $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$, оказались равными соответственно ~10K и ~12K. Кроме того, на зависимости $\chi(T)$ для $TlFeS_2$ [6] при температуре ~200K имеется широкий максимум, который удовлетворяет условию $T \gg T_N$, вытекающему из модели Изинга-Гейзенберга.

В публикации [7] проведенные нейтронографические исследования обнаружили для $TlFeS_2$ ниже 16K антиферромагнитное упорядочение (дальний магнитный порядок с $T_N \approx 16K$). В [8] на зависимости $\chi(T)$ для $TlFeS_2$ при $T \approx 13K$ наблюдается аномалия, указывающая на трехмерный антиферромагнитный переход. Однако авторы [8] эту аномалию не замечают и за температуру Нееля принимают аномалию при $T \approx 190K$, которая наблюдалась ими в мѐссбауэровском исследовании, т.е. делают такой же ошибочный вывод, что и авторы работы [5]. Что касается широких минимумов при $T_{min} \approx 196K$ ($TlFeS_2$) и $T_{min} \approx 290K$ ($TlFeSe_2$), которые видны на зависимости $\chi^{-1}(T)$ (Рис.3), измеренной как в произвольном кристаллографическом направлении (сплошные квадратики), так и в направлении оси $\vec{c}$ [5], то, как отмечается в [9], магнитная восприимчивость низкоразмерного

антиферромагнетика характеризуется наличием широкого максимума в случае $\chi(T)$ или широкого минимума для $\chi^{-1}(T)$, что связано с сильноразвитым ближним магнитным порядком при $T>>T_N$. Исходя из этого утверждения, можно сделать вывод, что в парамагнитной области $TlFeS_2$ выше температуры 12К формируется квазиодномерное антиферромагнитное упорядочение, сохраняющееся до 196К, после чего наступает разупорядочение магнитной структуры сильноцепочного антиферромагнетика $TlFeS_2$, а для $TlFeSe_2$ выше температуры 14К формируется квазиодномерное магнитное упорядочение, сохраняющееся до 290К, после чего наступает разупорядочение магнитной структуры сильноцепочного антиферромагнетика $TlFeSe_2$.

О низкоразмерности магнитной структуры антиферромагнетиков $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ говорит и то обстоятельство, что на температурной зависимости их теплоемкости, исследованной в адиабатическом калориметре при постоянном давлении $C_p(T)$ в интервале температур 5÷300К, наблюдается аномалия с явным отклонением от λ–типа [6].

В заключение отметим, что методом ДТА была выявлена конгруэнтность плавления соединений $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$. Анализ публикаций, проделанный нами по магнитным свойствам соединений $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$, позволил заключить, что эти соединения являются квазиодномерными антиферромагнетиками с температурами Нееля (T_N) соответственно равными ~12К и ~14К, которые характеризуют дальний магнитный порядок в $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$. Некоторая размытость трехмерного фазового перехода антиферромагнетиков $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ говорит о том, что ниже температуры Нееля в них существует неколлинеарное антиферромагнитное упорядочение. Широкие минимумы, имеющиеся на температурной зависимости обратной магнитной восприимчивости $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$ при температурах соответственно ~196К и ~290К, характеризуют ближний магнитный порядок в этих квазиодномерных антиферромагнетиках.

1. A.Kutoglu, *Naturwissenchaften B*, **61** (1974) 125.
2. K.Klepp, H.Boller, *Monatsh. Chem. B*, **110** (1979) 1045.
3. M.Zabel, K.Range, *Naturforsch. B,* **34** (1979) 1.
4. Г.И.Маковецкий, Е.И. Касинский, *Неорган. материалы*, **20** (1984) 1752.
5. Z.Seidov, H.Krug von Nidda, J.Hemberger, A.Loidl, G.Sultanov, E.Kerimova, A.Panfilov, *Phys. Rev.B*, **65** (2001) 014433.
6. M.A. Aldzhanov, N.G.Guseinov, G.D.Sultanov, M.D.Nadzafzade, *Phys.Stat.Sol.(b),* **159** (1990) K107.
7. H.Sabrowsky, M.Rosenberg, D.Welz, P.Deppe, W.Schafer, *Magnetizm and Magnetic Mater,* **54-57** (1986) 1497.
8. D.Welz, P.Deppe, W.Schafer, H.Sabrowsky and M.Rosenberg, *Phys.Chem.Solids,* **50** (1989) 297.
9. К.С.Александров, Н.В.Федосеева, И.П.Спевакова, *Магнитные фазовые переходы в галлоидных кристаллах, Новосибирск, Наука*, (1983) 193с.
10. M.Rosenberg, A.Knulle, H.Sabrowsky, C.Platte, *Phys. Chem. Solids*, **43** (1982) 87.
11. Р.Г.Велиев, Р.З.Садыхов, Ю.Г.Асадов, Э.М.Керимова, А.И.Джаббаров, *Кристаллография*, **53** (2008) 131.
12. М.А.Алджанов, А.А.Абдуррагимов, С.Г.Султанова, М.Д.Наджафзаде, *ФТТ*, **49** (2007) 309.
13. M.Aljanov, M.Nadjafzade, Z.Seidov, M.Gasumov, *Tr. J. of Physics,* **20** (1996) 1071.
14. Д.Гуденаф, *Магнетизм и химическая связь, Москва, Металлургия,* (1968) 325.

TlS – FeS, TlSe – FeSe SİSTEMLƏRİNİN HAL DİAQRAMMASI VƏ $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$ BİRLƏŞMƏLƏRİNİN MAQNİT XASSƏLƏRİ HAQQINDA

R.Q.VƏLİYEV, E.M.KƏRİMOVA, F.M.SEYİDOV, R.Z.SADIXOV, N.Z.HƏSƏNOV

Differensial-termik analiz metodu ilə TlS – FeS və TlSe – FeSe sistemlərində faza tarazlığı öyrənilərək, ərimə temperaturları uyğun olaraq 930K və 875K olan konqruent əriyən $TlFeS_2$ və $TlFeSe_2$ birləşmələri aşkar edilmişdir. $TlFeS_2$ və $TlFeSe_2$ birləşmələrinin maqnit xassələri üzrə dərc olunan işlərin analizi nəticə çıxarmağa imkan verir ki, bu birləşmələr güclü anizotrop-kvazibirölçülü antiferromaqnetikdirlər.

STATE DIAGRAM OF SYSTEM TlS–FeS, TlSe–FeSe, AND ABOUT THE MAGNETIC PROPERTIES OF $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$

R.G.VELİYEV, E.M.KERİMOVA, F.M.SEYİDOV, R.Z.SADIXOV, N.Z.GASANOV

Using method of differential-thermal analysis we have studied phase equilibrium in the systems of TlS-FeS and TlSe-FeSe, in which we have discovered congruently melting compounds $TlFeS_2$ and $TlFeSe_2$ with melting temperatures equal to 930K and 875K respectively. Analysis of publications, carried out by us according to magnetic properties of $TlFeS_2$ and $TlFeSe_2$ compounds, have brought to conclusion that these compounds are strongly anisotropic quasi one-dimensional antiferromagnetics.

Редактор: Г.Султанов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

СПЕКТР ВОЗБУЖДЕНИЯ И ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ИНТЕНСИВНОСТИ ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ КРИСТАЛЛОВ $CaGa_2S_4$:Pr,Ce

С.А.АБУШОВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33

В настоящей работе приводятся результаты исследования спектров фотолюминесценции (ФЛ), спектра возбуждения ФЛ (ВФЛ) и температурной зависимости интенсивности излучения кристалла $CaGa_2S_4$:Pr,Ce. Показано, что широкополосное излучение с максимумами при 466 и 516нм обусловлено внутрицентровыми переходами $5d\rightarrow{}^2F_{5/2}$ и $5d\rightarrow{}^2F_{7/2}$ иона Ce^{3+}, а очень узкие полосы излучения при 494, 610, 631, 653 и 742нм связаны с внутрицентровыми переходами ${}^3P_0$-${}^3H_4$, ${}^1D_2$-${}^3H_4$, ${}^3P_0$-${}^3H_6$, ${}^3P_0$-${}^3F_2$, ${}^3P_0$–${}^3F_4$ иона Pr^{3+}. Из температурной зависимости интенсивности определены энергии активации температурного гашения ФЛ ионов Pr^{3+}и Ce^{3+}в кристаллах $CaGa_2S_4$и соответственно равны 0.81 и 0.24эВ.

ВВЕДЕНИЕ

Стационарная ФЛ при комнатной температуре в кристалле $CaGa_2S_4$:Pr,Ce исследована авторами [1], а температурная зависимость спектра излучения и спектр возбуждения ФЛ этих кристаллов, судя по существующей литературе, не исследованы. Поскольку температурная зависимость формы спектра, интенсивности излучения и спектр ВФЛ являются более информативными, проведение указанных экспериментов имеет как научный интерес с точки зрения установления механизма ФЛ, так и с точки зрения практических применений. Как было отмечено в [1,2], $CaGa_2S_4$ является эффективной матрицей для редкоземельных ионов, которые в ней эффективно возбуждаются как оптической накачкой, рентгеновским излучением, электронным пучком, так и электрическим полем.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Соединения $CaGa_2S_4$:Pr, $CaGa_2S_4$:Ce и $CaGa_2S_4$:Pr,Ce синтезированы из бинарных соединений CaS и Ga_2S_3, взятых в стехиометрических соотношениях в откачанных до 10^{-4}мм рт.ст. кварцевых ампулах методом твердотельной реакции. Активаторы Pr и Ce вводились в шихту в виде PrF_3 и CeF_3. Содержания активаторов варьировалось в интервале 1,0÷10%. Синтез проводился в однозонной печи сопротивления при 1400К в течение 10 часов. После синтеза проводился отжиг в течение 5 часов. Спектры ФЛ снимались на установке СДЛ–1. Источником возбуждения служил InGaN светодиод ($\lambda_{воз}$=410нм), а приемником излучения – ФЭУ -39А. Спектр возбуждения снят на спектрометре LS–55.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На Рис.1 представлены спектры ФЛ кристалла $CaGa_2S_4$:5%Pr,5%Ce при 77(1) и 300К(2). Спектры охватывают широкую область длин волн (410÷750нм), состоят из двух широких полос с максимумами около 466 и 516нм и очень узких полос с максимумами при 494, 610, 631, 653, и 742нм. При 110К широкие и узкие полосы излучения очень интенсивны. С ростом температуры интенсивность всех полос уменьшается, а энергетическое положение их не изменяется, полоса при 610нм становится едва заметной, слабые полосы при 742нм при 273К исчезают. Следует отметить, что такие широкие полосы с максимумами около 466 и 516нм наблюдались и в кристаллах $CaGa_2S_4$, активированных ионами церия [3,4].

Для выяснения механизма ФЛ в кристаллах $CaGa_2S_4$:Pr,Ce исследован спектр возбуждения ФЛ, который представлен на Рис.2 . Как видно из этого рисунка,

часть спектра ВФЛ охватывает широкий диапазон длин волн (400÷550нм) и состоит из полос с максимумами 420, 433, 450, 485, 522нм и коротковолновой широкой полосы, перекрывающейся полосой с максимумом 422нм.

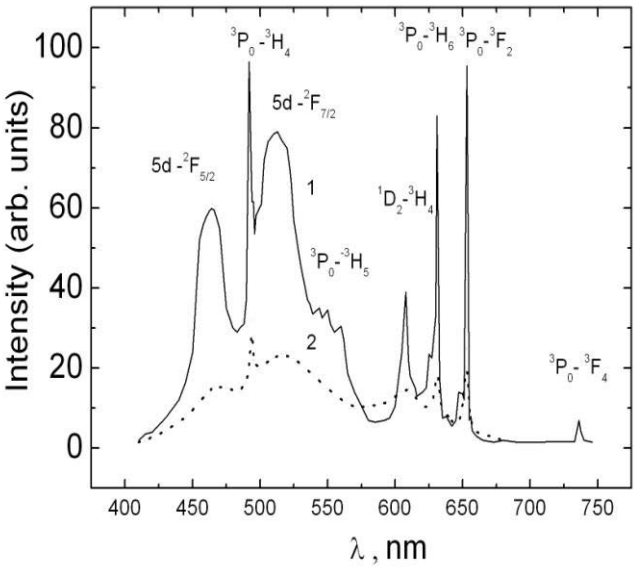


Рис.1.
Спектры фотолюминесценции кристаллов $CaGa_2S_4$:5%Pr, 5%Ce при температурах 110(1) и 273К(2)

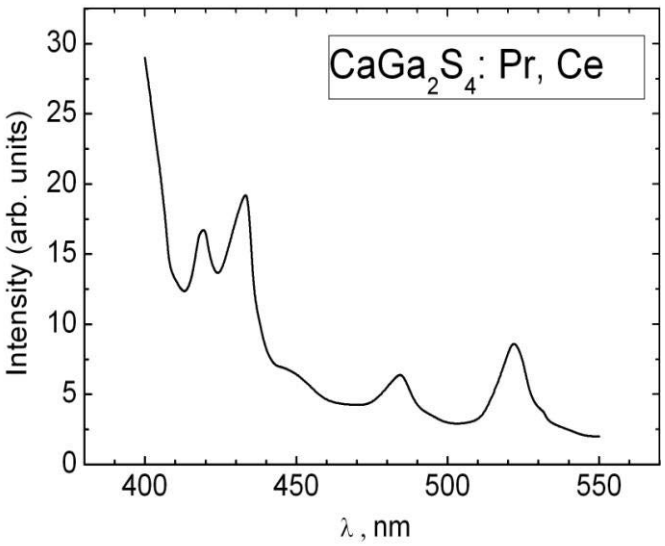
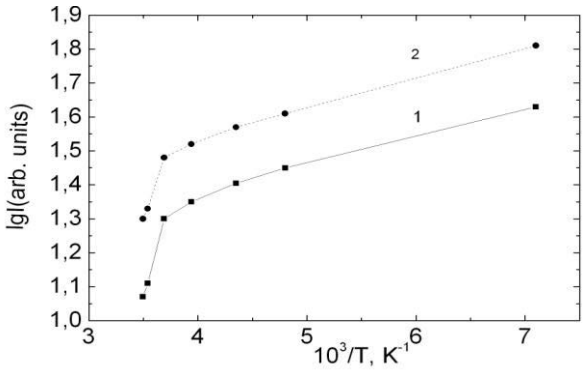
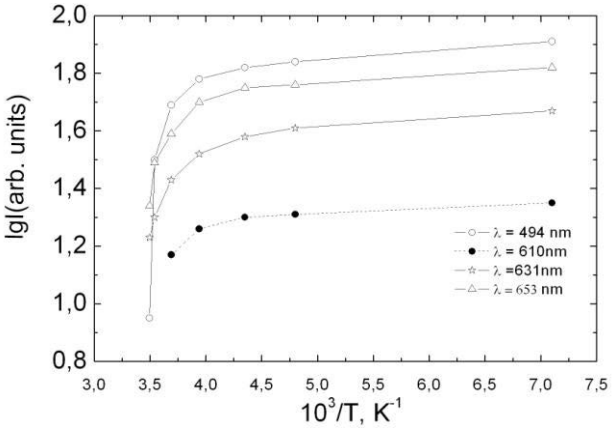


Рис.2.
Спектр возбуждения люминесценции полосы 610нм кристалла $CaGa_2S_4$:5%Pr,5%Ce при 300К.

На Рис.3а в координатах $\lg I \sim 10^3/T$ представлены зависимости интенсивности излучения полос с максимумами 466 и 516нм. Видно, что зависимости от температуры для обеих полос почти одинаковы, т.е. с ростом температуры в области 110÷273К интенсивность ФЛ уменьшается незначительно, а дальнейший рост температуры приводит к резкому спаду ее.



а



б

Рис.3.
Температурная зависимость интенсивности полос излучения Ce^{3+}(а) и Pr^{3+}(б) в кристалах $CaGa_2S_4$:5%Pr,5%Ce.

По участкам резкого спада интенсивности ФЛ для каждой полосы определена энергия активации температурного гашения ФЛ, равная 0.24эВ.

Температурные зависимости полос излучения 494, 610, 631 и 653нм представлены на Рис.3(б). Видно, что низкотемпературные участки этих зависимостей (130÷273К) показывают более слабую зависимость от температуры, чем полосы с максимумами около 466 и 516нм (Рис.1(а)).

Сравнение спектров ФЛ кристаллов $CaGa_2S_4$:Pr,Ce в области температур 77÷300К показывает, что энергетические положения широких и узких полс излучения не изменяются, интенсивность их при увеличении содержания Ce и Pr увеличивается. Это свидетельствует о том, что наблюдаемые полосы излучения связаны с введением Ce и Pr в эти кристаллы. Следует отметить, что в спектрах ФЛ кристаллов $CaGa_2S_4$, активированных только празеодимом, интенсивность узких полос, наблюдаемых при 494, 631 и 653нм слабее интенсивноти тех же полос в кристаллах, содержащих соактиваторы Pr и Ce, а широкие полосы с максимумами около 466 и 516нм отсутствуют. Это, скорее всего, связано с отсутствием в этих кристаллах Ce, у которого есть большая вероятность передачи энергии возбуждения Pr в кристаллах $CaGa_2S_4$:Pr,Ce, поскольку имеет место перекрытие спектра возбуждения Pr спектром излучения Ce в этих кристаллах (Рис.1 и Рис.2), т.е. передачей энергии от иона Ce^{3+} к иону Pr^{3+}. Такая передача энергии между ионами Ce^{3+} иону Eu $^{2+}$нами наблюдалась в тиогаллатах Sr и Ba и селеногаллате Ba [5-7], т.е в указанных кристаллах происходит безызлучательная передача энергии от Ce^{3+} к Eu $^{2+}$. При этом, при больших содержаниях соактиваторов наблюдалось исчезновение коротковолновой полосы излучения иона Ce^{3+}.

Анализ результатов исследования ФЛ кристаллов $CaGa_2S_4$:Pr,Ce позволяет показать, что наблюдаемое в спектрах излучения в широком температурном интервале (77÷300К) широкополосное излучение с максимумами около 466 и 516нм обусловлено внурицентровыми переходами $5d \rightarrow {}^2F_{5/2}$ и $5d \rightarrow {}^2F_{7/2}$ иона Ce^{3+}, а узкополосное излучение (почти линейчатое) при 494, 610,631 и 653 и 742нм связано с внутрицентровыми переходами ${}^3P_0$-${}^3H_4$, ${}^1D_2$-${}^3H_4$, ${}^3P_0$-${}^3H_6$, ${}^3P_0$-${}^3F_2$, ${}^3P_0$–${}^3F_4$ иона Pr^{3+}. Наблюдаемые в спектре ВФЛ полосы с максимумами при 420, 433, 485 и 522нм при регистрации излучения на длине волны 610нм, по-видимому, обусловлены переходами ${}^3H_4$ - ${}^3P_{0,1,2}$ + ${}^1I_6$ и ${}^3H_4$ - ${}^1D_2$ иона Pr^{3+}. Такие полосы излучения и возбуждения наблюдались авторами ряда работ [8÷11] и установлено, что они обусловлены внутрицентровыми переходами иона Pr^{3+}. Отличие температурных зависимостей отдельных полос ФЛ (Рис.3(а и б)) ионов церия и празеодима можно объяснить тем , что как и кристаллическое поле матрицы, так и температура сильнее влияет на ионы Ce^{3+}, чем на ионы Pr^{3+}, т.е. ионы церия сильнее подвержены влиянию внешних воздействий.

Таким образом, исследование температурной зависимости спектров ФЛ, спектров возбуждения ФЛ и температурной зависимости отдельных полос излучения кристаллов $CaGa_2S_4$, соактивированных редкоземельными ионами Pr^{3+} и Ce^{3+} показывает, что их люминесцентные свойства устойчивы в широком диапазоне температур. Из температурных зависимостей интенсивностей полос излучения определены энергии активации температурного гашения ФЛ для ионов Pr^{3+}и Ce^{3+}, которые соответственно равны 0, 81 и 0,24эВ.

1. C.Anedda, D.Carbonaro, R.Chiriu, R.Corpino, M.Marceddi, P.ricci, A.Georgobiani, B.G.Tagiev, O.B.Tagiev, S.Abushov, M.Tiginyanu, *Phys.stat. sol. (c),* **3** (2006) 2717.
2. P.Benalloul, C.Barthou, C.Fouassier, A.N.Georgobiani, L.S.Lepnev, A.N.Gruzintsev, B.G.Tagiev, O.B.Tagiev, R.B.Jabbarov, *J. Electrochem. Soc.,* **150** (2003) G62.
3. A.Kato, M.Yamazaki, H.Najafov, K.Iway, A.Bayramov, C.Hidaka, T.Takizava, S.Iida, *J. Phys. Chem. Solids,* **64** (2003) 1511.
4. A.Bessiere, P.Dorenbos, C.W.E. van Eijk, E.Yamagishi, C.Hidaka, and Takizawa, *Electrochem. Soc*., **151** (2004) H254.

5. С.А.Абушов, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXX** №2 (2010) 112.
6. A.N.Georgobiani, B.G.Tagiev, S.A.Abushov, O.B.Tagiyev, Zheng Xu, and Suling Zhao, *Inorganic Materials,* **44** (2008) 110.
7. Б.Г.Тагиев, С.А.Абушов, О.Б.Тагиев, *Журнал прикладной спектроскопии,* **77** (2010) 124.
8. П.А.Родный, А.Н.Мишин, А,С.Потапов, *Опт. и спектр.,* **93** (2002) 775.
9. П.А.Родный, И.В.Березовская, А.С.Волошиновский, Г.Б.Стрыганюк, А.С.Потапов, *Опт. и спектр.,* **94** (2003) 759.
10. Xiao–jun Wang, S.H.Huang, R.Reeves, W.Wells, M.J.Dejneka, R.S.Meltzer, W.M.Yen, J.of Luminescence, **94–95** (2001) 229.
11. Ho Seong Jang, Won Bin Im, Dong Chin Lee, Duk Young Jeon, Shi Surk Kim, *J.of Luminescence,* **126** (2007) 371.

$CaGa_2S_4$:Pr,Ce KRİSTALLARININ FOTOLÜMİNESSENSİYASININ HƏYƏCANLANMA SPEKTRİ VƏ İNTENSİVLİYİNİN TEMPERATUR ASILILIĞI

S.A.ABUŞOV

Bu işdə 77÷300K temperatur intervalında $CaGa_2S_4$:Pr,Ce kristallarının fotolüminessensiyasının (FL) spektrlərinin, FL –nın həyəcanlanma spektrlərinin (FLH S) və şüalanmasının intensivliyinin temperaturdan aslılığının tədqiqinin nəticələri verilmişdir.Göstərilmişdir ki, maksimumları 466 və 516nm olan genişzolaqlı şüalanma Ce^{3+}ionunun 5d→$^2F_{5/2}$ və 5d→$^2F_{7/2}$ mərkəzdaxili keçidləri ilə, maksimumları 494, 610, 631, 653 и 742nm olan çox dar zolaqlardan ibarət olan şüalanma isə Pr^{3+}ionunun $^3P_0$-$^3H_4$, $^1D_2$-$^3H_4$, $^3P_0$-$^3H_6$, $^3P_0$-$^3F_2$, $^3P_0$–$^3F_4$ mərkəzdxili keçidləri nin nəticəsidir.İntesivliklərin temperatur aslılıqlarından Pr^{3+}и Ce^{3+}ionlarının $CaGa_2S_4$:Pr,Ce kristallarında Fl–nın sönməsinin uyğun olaraq 0.81və 0.24eV – a bərabər olan aktivləşmə enerjiləri vüəyyən edilmişdir.

THE EXCITATION SPEKTRUM AND THE TEMPERATUR DEPENDANCE OF THE PHOTOLUMINESCE INTENSITY OF THE CRYSTALS $CaGa_2S_4$: Pr, Ce

S.A.ABUSHOV

The results of a study of the photoluminescence spectra (PL), PL excitation spectrum (PLE) and the temperature dependence of the intensity of the crystal $CaGa_2S_4$: Pr, Ce emissionhave been presented. It has been shown that the broadband emission with maxima at 466 and 516nm are due to intracenter transitions 5d→$^2F_{5/2}$ and 5d→$^2F_{7/2}$ of $Ce3^+$ ion, and very narrowbands of emission at 494, 610, 631, 653 and 742nm have been associated with intracenter transitions ^{3}P0-$^3H_4$, $^1D_2$-$^3H_4$, ^{3}P0-$^3H_6$, ^{3}P0-$^3F_2$, ^{3}P0-$^3F_4$ of Pr^{3+} ion. From the temperature dependence of the intensity, activation energies of temperature quenching of PL of $Pr^{3+}$and Ce^{3+}ions in $Pr^{3+}$and Ce^{3+} crystals $CaGa_2S_4$ are determined and they equal to 0.81 and 0.24eV, respectively.

Редактор:О.Тагиев

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ИЗУЧЕНИЕ ЭКЗОТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НУКЛОНОВ В ЯДРАХ РАССЕЯНИЕМ ЭЛЕКТРОНОВ И ПРОТОНОВ

М.М.МИРАБУТАЛЫБОВ

Азербайджанская государственная нефтяная академия
AZ 1007, Баку, пр. Азадлыг, 20

Работа посвящена проверке экзотических гипотез о свойствах нуклона в ядерной среде. Рассмотрена гипотеза разбухания нуклона, предложенная для объяснения эффекта ЕМС. При анализе следствий этой гипотезы, для зарядовых плотностей в ядрах использованы функции вычисленные на основе самосогласованной теории конечных ферми-систем. Сечения быстрых электронов при энергии 500МэВ и протонов при 1ГэВ рассчитаны для ядер $^{116}_{50}Sn$ и $^{40}_{20}Ca$ методом искаженных волн. При этом ограничения на величину разбухания нуклонов при электронном рассеянии составляют ~ 8%, а нуклонном - 10%.

В настоящее время общепризнано, что квантовая хромодинамика кварков и глюонов является точной теорией сильных взаимодействий. В этом смысле кварковые и глюонные степени свободы определяют структуру атомных ядер. Однако их прямое и явное проявление следовало бы ожидать в некоторых специальных условиях, таких, например, как жесткие взаимодействия при высоких энергиях. Поиски «ядерной экзотики» в такого рода процессах вызывают в последние годы повышенный интерес [1]. Хорошо известным примером такого рода является эффект ЕМС. Он заключается в заметном различии структурных функций свободных и связанных в ядре нуклонов [2].

Этот эффект породил множество объяснений, большинство из которых аппелирует к ядерной экзотике. Так, было сделано предположение о значительной примеси мультикварковых конфигураций, была высказана гипотеза разбухания нуклона в ядерной среде и т.п. Эта гипотеза возникла естественным образом как качественное объяснение наблюдаемого в эффекте ЕМС смягчения распределения кварков по импульсам внутри нуклонов ядра. Разбухание нуклона (т.е. увеличение радиуса конфайнмента, определяющего область, в которой движутся кварки) можно связать с вероятностью перекрытия волновых функций нуклонов на малых расстояниях. Возможны, однако, и другие механизмы эффекта разбухания.

Весьма жесткие ограничения на возможное изменение нуклонного радиуса в среде можно получить из анализа сечений упругого рассеяния электронов и протонов промежуточных энергий. В этих процессах ядерная структура представлена, главным образом, одночастичными нуклонными плотностями. Поэтому наиболее точное вычисление сечений рассеяния электронов и протонов очень важны.

Применяемая искаженно-волновая теория рассеяния высокоэнергетических электронов [3] и протонов с промежуточными энергиями на ядрах, развитая в [4], в этом смысле, представляет определенный интерес.

Упругое рассеяние электронов высоких энергий на ядрах является весьма чувствительным и эффективным средством изучения обсуждаемого эффекта разбухания. Оно позволяет установить довольно жесткие ограничения сверху на возможное увеличение радиуса нуклона в ядерном веществе.

Выражение дифференциального сечения упругого рассеяния электронов на сферических ядрах в искаженно-волновом высокоэнергетическом приближении имеет следующий вид [5]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Mott}\left[F(q)\right]^2 , \qquad (1)$$

здесь
$$(\frac{d\sigma}{d\Omega})_{Mott} = (\frac{2Ze^2k}{q^2})^2 \cos^2 \theta/2 \qquad (2)$$
сечение Мотта, т.е. сечение рассеяния электронов на точечном ядре.

При этом формфактор выражается как фунционал формфакторов плоско-волного приближения
$$F(q) = \frac{2\pi i}{q(1-\frac{V(0)}{k})}\{F_B(q) + \Re(q)\frac{\partial F_B(q)}{\partial q}\}, \qquad (3)$$
здесь плоско-волновой формфактор имеет вид
$$F_B(q) = \frac{1}{Z\sqrt{4\pi}}\sum_{\varepsilon=\pm 1}\varepsilon\int_0^\infty \ell^{iqr\varepsilon}\rho_{ch}(r)rdr \qquad (4)$$
и
$$\Re(q) = -3ib_0 q - \frac{q}{k}(1-\frac{V(0)}{k}) + \frac{2b_0(4k^2-q^2)^2}{q(1-\frac{V(0)}{k})}. \qquad (5)$$

Ядерная структура в этом процессе в рамках квазичастичной ядерной модели, представима, в основном, зарядовой плотностью $\rho_{ch}(r)$. Эта величина рассчитывалась с помощью процедуры свертки теоретических точечных распределений протонов $\rho_p(r)$ и нейтронов $\rho_n(r)$ с соответствующими распределениями заряда внутри протона $f_p(r)$ и нейтрона $f_n(r)$ [6]
$$\rho_{ch}(r) = \int d^3r' \; [f_p(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\cdot\rho_p(\mathbf{r}') + f_n(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\rho_n(\mathbf{r}')]. \qquad (6)$$

Функции $f_p(r)$ и $f_n(r)$ выбраны в виде
$$f_p(r) = (8\pi a_1^3)^{-1}\exp(-r/a_1), \quad a_1 = 0{,}25 \text{ фм}, \qquad (7)$$
$$f_n(r) = (8\pi a_2^3)^{-1}\exp(-r/a_2) - (8\pi a_2^3)^{-1}\exp(-r/a_3), a_2 = 0{,}22 \text{ фм}, \; a_3 = 0{,}242 \text{ фм}. \qquad (8)$$

При этом для распределений плотности протонов и нейтронов используем выражения
$$\rho_p(r) = \rho_{0p}^{(0)}(1 + w\frac{r^2}{R^2})\tilde{\rho}_N(r/b), \quad \rho_{0p}^{(0)} = \frac{Z}{A}\rho_0^{(0)} \qquad (9)$$
и
$$\rho_n(r) = \rho_{0n}^{(0)}(1 - w\frac{Z}{A-Z}\frac{r^2}{R^2})\tilde{\rho}(r/b), \quad \rho_{0n}^{(0)} = \frac{A-Z}{A}\rho_0^{(0)} \qquad (10)$$
с выполнением условий изоскалярности нуклонной плотности, т.е. суммы распределения нейтронной и протонной плотностей
$$\rho_N(r) = \rho_p(r) + \rho_n(r) \qquad (11)$$
в расчетах, которая выбирается в виде ферми-функции
$$\rho_N(r) = \rho_0^{(0)}(1 + \exp(\frac{r-R}{b}))^{-1} = \rho_0^{(0)}\tilde{\rho}_N(r/b). \qquad (12)$$

Теперь, учитывая в формфакторе (4) зарядовую плотность $\rho_{ch}(r)$ из (6), получим
$$F_B(q) = \frac{-3ib}{(2\pi)^{5/2}}\sum_{m=1}^{3}\frac{\ell^{i\pi b/a_m}}{a_m^2(1+q^2a_m^2)}L_m(b,w)[\alpha_m(q)\sin(qR) + \beta_m(q)\cos(qR)], \qquad (13)$$
здесь

$$\alpha_m(q) = 1 + \frac{a_m}{R}\frac{1-q^2a_m^2}{1+q^2a_m^2} \quad , \quad \beta_m(q) = qa_m + \frac{a_m}{R}\frac{2qa_m}{1+q^2a_m^2}, \tag{14}$$

$$L_1(b,w) = 1 + w + i(1+2w)\frac{2\pi b}{R} \quad , \quad L_2(b,w) = L_3(b,w) = \frac{N}{Z} - w + i(\frac{N}{Z} - 2w)\frac{2\pi b}{R}. \tag{15}$$

Если предположить, что нуклоны в ядре разбухают, то естественно провести в (7) и (8) замену $a_m \to a_m \cdot (1+\alpha)$. Параметр α характеризует относительное увеличение радиуса протонов и нейтронов.

Анализ сечений упругого рассеяния электронов при падающей энергии ~500МэВ, проведены на ядре $^{116}_{50}Sn$, результаты расчетов приведены на Рис.1. При этом, для количественного выявления эффекта изменения зарядового радиуса α, использована величина

$$\chi_0^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} (\sigma_i^{th} - \sigma_i^{\exp})^2 / (\sigma_i^{\exp})^2, \tag{16}$$

которая количественно характеризует точности описания сечений.

При этом для усредненного значения параметра получаем $\alpha \approx 0{,}02$. Такой анализ позволил установить верхнюю границу на величину разбухания. Из электронного рассеяния следует, что эта граница $\cong 8\%$.

Прямая проверка гипотезы разбухания одновременно для протонов и нейтронов может быть осуществлена в анализе сечений упругого рассеяния протонов промежуточных энергий на ядрах.

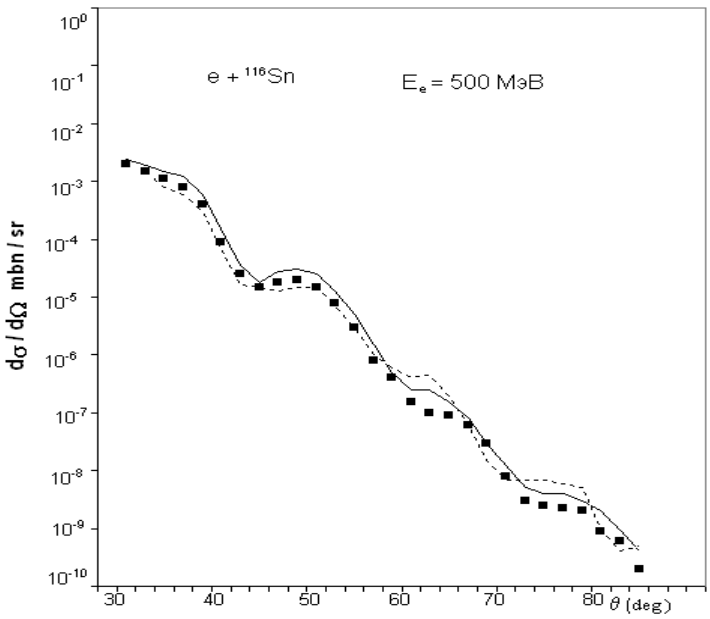


Рис.1.

Чувствительность сечения упругого рассеяния электронов при энергии E_e=500МэВ, на $^{116}_{50}Sn$ к изменению зарядового радиуса протонов и нейтронов: сплошная линия α =0,02, штриховая - α =0.

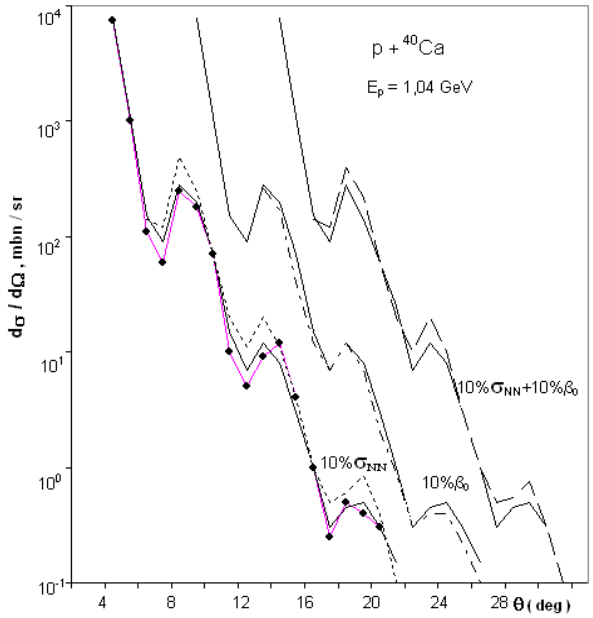


Рис. 2.

Чувствительность сечения упругого рассеяния протонов на $^{40}_{20}Ca$ (E_p=1,04ГэВ) к значению эффективного параметра разбухания α_{ef}, сплошные линии : α_{ef} =0; штриховые - α_{ef} =0,1, точки – экспериментальные данные [7]. На левых кривых варьируется только σ_{NN}, на средних – только β_0, на правых - σ_{NN} и β_0 вместе (сдвинутые относительно друг друга на 5°).

Среди разнообразных адрон-ядерных реакций, в которые входит такое сечение, особое место занимает упругое рассеяние протонов с энергией около 1ГэВ на ядрах. Эта область активно изучалась теоретически и экспериментально. Здесь имеются многочисленные измерения высокой точности дифференциальных сечений упругого рассеяния в достаточно большом диапазоне импульсов $q \le 3{,}5\ фм^{-1}$. С другой стороны, это – область применимости дифракционной теории многократного рассеяния, развитой в [4], дифференциальное сечение в котором при упругом рассеянии принимает вид

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = (\frac{d\sigma}{d\Omega})_{NN} \left|F(\mathbf{q})\right|^2, \tag{17}$$

где

$$(\frac{d\sigma}{d\Omega})_{NN} = \frac{\sigma_{p,n}^2 k^4 (1+\varepsilon_{p,n}^2)}{16\pi^2 q^2} \ell^{-\beta_0^2 q^2} \tag{18}$$

является дифференциальным сечением упругого рассеяния падающих протонов на квазисвободном нуклоне ядра мишени. В этом случае амплитуда протон-ядерного рассеяния пропорциональна NN-амплитуде, следовательно, величине σ_{NN}.

Если бы размер связанного нуклона увеличивался в среде, то это должно было бы приводить не только к смягчению его формфактора, но и к увеличению его сечения взаимодействия с налетающим адроном. С целью учета различий в структурных функциях свободного и связанного в ядре нуклонов, изменим, параметры σ_{NN} и β_0 в ядре, т.е. заменим $\sigma_{NN} \to (1+\alpha_{ef})\sigma_{NN}$ и $\beta_0 \to (1+\alpha_{ef})\beta_0$. Этим мы косвенным путем учитываем разбухание нуклонов в ядре, т.е. увеличение нуклонного размера в среде [6].

В вычислениях для параметров свободного NN - взаимодействия, входящих в выражение (18), при энергии падающих протонов 1ГэВ принимаются следующие значения

$$\begin{aligned} &\sigma_p = 4.75\ фм^2, \quad \varepsilon_p = -0.05, \quad \beta_0^2 = 0.21\ фм^2; \\ &\sigma_n = 4.04\ фм^2, \quad \varepsilon_n = -0.5; \end{aligned} \tag{19}$$

здесь $\sigma_p(\sigma_n)$ – полное сечение pp (pn) – рассеяния, β_0^2 - наклон дифракционного конуса.

Как показано в [4], формфактор ядра с ферми-плотностью имеет следующий вид

$$F(q) = -\frac{2\pi^{3/2}\rho^{(0)}Rb}{k}\sum_{n=0}^{3}\Re_n(q)\frac{\partial^n}{\partial q^n}[\frac{\cos(qR)-(\pi b)/(qR)\sin(qR)}{sh(\pi bq)}]. \tag{20}$$

На Рис.2 на примере ${}^{40}_{20}Ca$ демонстрируется чувствительность сечения упругого рассеяния протонов, с падающей энергией 1ГэВ [7], к изменениям σ_{NN} и β_0 при следующих значениях эффективного параметра разбухания α_{ef} : $\alpha_{ef} = 0$ и $\alpha_{ef} = 0.1$.

Рассмотрены вариации σ_{NN} и β_0 в отдельности и их комбинации. Реалистической ситуации отвечает совместное изменение этих величин. Как и следовало ожидать, чувствительность к вариациям σ_{NN} оказалась заметно большей, чем к вариациям β_0. Из анализа результатов следует, что сечение протон-ядерного рассеяния является очень чувствительным к изменениям полного нуклон-

нуклонного сечения (σ_{NN}). Такая высокая чувствительность результатов к вариациям σ_{NN} делает протон-ядерное рассеяние, в некотором отношении, более подходящим средством изучения эффекта разбухания, чем электронное рассеяние.

Установлена довольно жесткая граница ~ 10%, на величину разбухания.

Таким образом, анализируя выше полученное, можно придти к такому заключению, что такая высокая чувствительность результатов к вариациям σ_{NN} и β_0 делает протон-ядерное рассеяние, в некотором отношении, более подходящим средством изучения эффекта разбухания. Можно сказать, что именно этот эффект породил множество объяснений, большинство из которых аппелирирует к ядерной экзотике. Так, было сделано предположение о значительной примеси мультикарковых конфигураций.

Проведенное рассмотрение показывает, что традиционная ядерная физика в условиях, когда имеются прецизионный эксперимент и достаточно хорошее теоретическое «обеспечение», может дать важную информацию для физики частиц. Это особенно важно в нынешней ситуации, когда проблема конфайнмента в КХД не решена, и развиваются различные модельные представления о структуре нуклона.

1. Otsuka Takaharn, Suzuki Tashio, *Nucl. Phys. A.,* **805** (2008) 127.
2. On Li, Li Zluxua, *J. Phys. G.,* **35** (2008) 055101.
3. D.R.Yennie, F.L.Boos, D.G.Ravenhall, *Phys. Rev. B*, **137** (1965) 882.
4. М.М.Мирабуталыбов, *Рос. АН, Ядерная физика,* **67** (2004) 2178.
5. А.В.Джавадов, М.М.Мирабуталыбов, *Изв. АН СССР, Сер.физ.,* **44** (1980) 1910.
6. Э.Е.Саперштейн, В.Е.Стародубский, *Физика элем. част. и атом. ядра*, **20** (1989) 293.
7. G.D.Alkhazov, T.Bauer, R.Beurtey e.a., *Nucl. Phys. A*, **274** (1976) 443.

ELEKTRON VƏ PROTONLARIN SƏPILMƏSI ILƏ NÜVƏ DAXILINDƏ NUKLONLARIN EKZOTIK XÜSUSIYYƏTLƏRININ ÖYRƏNILMƏSI

M.M.MIRABUTALIBOV

Nüvədə nuklonların ekzotik xüsusiyyətlərini öyrənilməsinə həsr olunmuş bu işdə, EMC effektinin izahı ücün nüvə daxilində nuklonların köpmə hipotezinə baxılmışdır. Bu hipotezin nəticələrinin analizi nüvədə elektrik yüklərinin paylanması üçün sonlu fermi-sistemləri nəzəriyyəsi əsasında hesablanan funksiyalardan istifadə olunmuşdur. Enerjisi ~ 500MeV olan elektronların $^{40}_{20}Ca$ nüvəsindən və enerjisi ~1GeV olan protonların $^{116}_{50}Sn$ - dən elastiki səpilməsinin effekiv kəsiyi təhrif olunmuş dalğalar metodu ilə hesablanmışdır. Nəticədə elektronların və protonlarin sıpilməsi ilə müəyyən edilmişdir ki, nüvə daxilində nuklonların köpməsi uyğun olaraq ~ 8% və 10% -ə qədər olmuşdur.

INVESTIGATION OF EKSOTIC PROPERTIES OF NUCLEONS IN NUCLEI BY THE SCATTERING OF ELECTRONS AND PROTONS

M.M.MIRABUTALYBOV

The resarch has been dedicated to the examination of eksotic hypothesis about nucleon proprties in the nuclear medium. The hypothesis of nucleon swelling, offered to explain EMC effect has been examined. Analysing the conseaquences of this hypothesis for the charge densities in nuclei, the functions derived on the base of self-consented theory of finite Fermi-systems have been used. The cross sections of fast electrons of 500 MeV and protons of 1GeV have been calculated for ^{116}Sn and ^{40}Ca in distorted-wave approximation. At that the restriction on the size of nucleon swelling have been about ~ 8 % for electron scattering and 10 % for protons scattering.

Редактор:О.Абдинов

ОПТИЧЕСКИЕ СПЕКТРЫ $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$

Н.З.ДЖАЛИЛОВ, М.А.МАХМУДОВА

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида,33

В работе приведены результаты измерения коэффициентов отражения R(E) поликристаллических образцов $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$ в интервале энергии луча 1÷6эВ, падающего нормально к поверхности. Определены с помощью соотношений Крамерса-Кронига их оптические параметры: коэффициент поглощения α, мнимая ε_2 и реальная ε_1 части диэлектрической проницаемости, показатель поглощения *к* и преломления *n*, функция характеристических объемных $-\mathrm{Img}\,\varepsilon^{-1}$ и поверхностных $-\mathrm{Img}(1+\varepsilon)^{-1}$ потерь электронов.

ВВЕДЕНИЕ

Работа содержит результаты определения оптических параметров $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$ на основе измерения коэффициента их отражения луча R(E) с энергией в интервале 1÷6эВ, падающего нормально к поверхности с помощью метода Крамерса-Кронига. Этот вопрос ранее рассмотрен не был, между тем материалы такого типа являются аналогами Ln_3X_4 и Ln_5X_7 [1] и обладают рядом интересных физических свойств: в них обнаружены сверхпроводимость и люминесцентные характеристики. Они также перспективны для изготовления термочувствительных сопротивлений и термопар, датчиков в устройствах дистанционного управления тепловыми процессами.

Как отмечается в [2], разрез $YbTe\text{-}Bi_2Te_3$ - квазибинарный, в системе кристаллизуются два соединения $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Te_7$. Ликвидус разреза состоит из ветвей первичной кристаллизации YbTe, $YbBi_2Te_4$, $YbBi_4Te_7$, α-твердых растворов на основе теллурида висмута. Соединение $YbBi_2Te_4$ образуется по перитектической реакции ж+YbTe⇔$YbBi_2Te_4$ при температуре 873К. Установлено, что $YbBi_2Te_4$ имеет полиморфные модификации: α-$YbBi_2Te_4$ при температуре 673К переходит в β-$YbBi_2Te_4$. Как показано в работах [3, 4], соединение $YbBi_2Te_4$ изоструктурно $YbSb_2Te_4$ и имеет кубическую решетку типа Th_3P_4 с параметром элементарной ячейки a=10,48±0,01Å, $d_{экс}$=6,35, $d_{выч}$=6,40г/см^3, микротвердость Hμ=1500Мпа. Соединение $YbBi_2Te_4$ - полупроводник с узкой запрещенной ΔE=0,34эВ зоной.

Соединение $YbBi_4Se_7$ плавится без разложения при температуре 963К, оно темно-серого цвета, на воздухе устойчиво. Плотность $d_{пикн}$=6,30г/см^3, микротвердость Hμ=1660Мпа. На монокристаллах изучена структура соединений $YbBi_2Se_4$ и $YbBi_4Se_7$ [5]. Структура соединения $YbBi_4Se_7$ относится к гексагональной сингонии. Параметры ячейки таковы: a=13,90, c=14,384Å, $d_{экс}$=7,45, $d_{выч}$=7,5430г/см^3. Электропроводность у $YbBi_4Se_7$ при 300К составляет $1{,}5\cdot10^{-4}$Ом$^{-1}\cdot$м$^{-1}$, а ширина запрещенной зоны равна ΔE=0,81эВ. Оптические спектры полупроводников связаны с их электронными структурами. Одним из основных параметров материала является его энергетический уровень, определяющий многие физико-химические свойства. Знание дисперсии материала позволяет заранее предвидеть принципиальные возможности осуществления определенных свойств и применения их в полупроводниковой электронике.

Целью работы являлось получение и исследование спектров оптических параметров $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Синтез $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$ был проведен аналогично синтезу соединений типа $LnBi_2S_4(Se_4,Te_4)$, $LnBi_4S_7(Se_7,Te_7)$. Синтез проводился, в основном, из

элементов висмута марки В-3; иттербия марки ИТб-1, селена элементарной марки В-5; теллура В-3 ампульным методом или же сплавлением бинарных соединений. Длина ампулы 150мм и диаметр 20мм. Синтез проводили в эвакуированных до (~10^{-2}Па) кварцевых ампулах при температуре 900÷1200К в зависимости от состава. После окончания синтеза проводили гомогенизирующий отжиг в течение 200ч при температуре на 100^0 ниже окончательной кристаллизации.

Из полученных материалов были приготовлены образцы для измерения коэффициента отражения $R(E)$. Измерения были проведены двулучевых способом в интервале энергии луча 1÷6эВ, падающего нормально к поверхности образцов.

Согласно уравнению Максвелла все оптические параметры взаимосвязаны, что видно из соотношения

$$\frac{\omega^2}{\upsilon^2} = \frac{\mu}{c^2} 4\pi\sigma(i\omega) + \frac{\mu\varepsilon}{c^2}\omega^2 ,$$

где ω – циклическая частота, с - скорость света в вакууме.

Компьютерная программа вычисления оптических параметров исследованных образцов была составлена Н.З.Джалиловым [6-15].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты измерения коэффициентов отражения R(E) и вычисленные на его основе значения оптических функций $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$, таких как коэффициент поглощения α, мнимая ε_2 и реальная ε_1 части диэлектрической проницаемости, показатель поглощения *к* и преломления *n*, функция характеристических объемных -Img ε^{-1} и поверхностных -Img$(1+\varepsilon)^{-1}$ потерь электронов представлены на Рис.1-Рис.6.

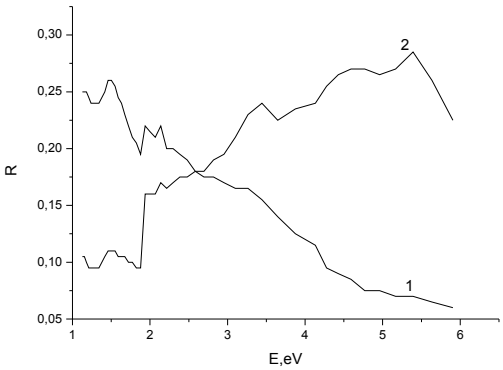


Рис.1.
Коэффициенты отражения R(E): $YbBi_2Te_4$ (кривая 1) и $YbBi_4Se_7$ (кривая 2).

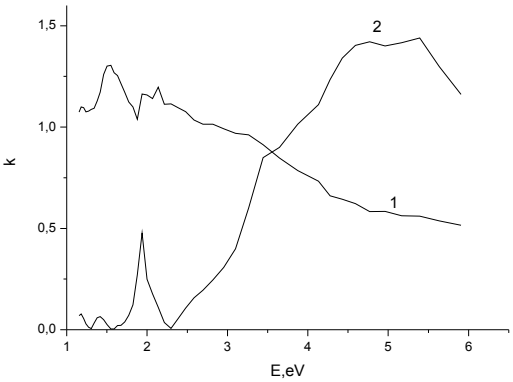


Рис.2.
Спектры показателя поглощения k(E): $YbBi_2Te_4$ (кривая 1) и $YbBi_4Se_7$ (кривая 2).

В Таблице приведены значения межзонных оптических переходов в $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$, определенных на основе $\varepsilon_2(E)$ в области энергий 1÷6э*В*.

Таблица.

Образцы	Межзонные оптические переходы в образцах $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$ в области энергии 1÷6 э*В*									
$YbBi_2Te_4$	1,17	1,30	1,45	1,50	1,62	1,82	1,93	2,13	2,29	2,81
$YbBi_4Se_7$	1,16	1,41	1,93	3,45	3,87	4,26	4,42	4,58	5,16	5,38

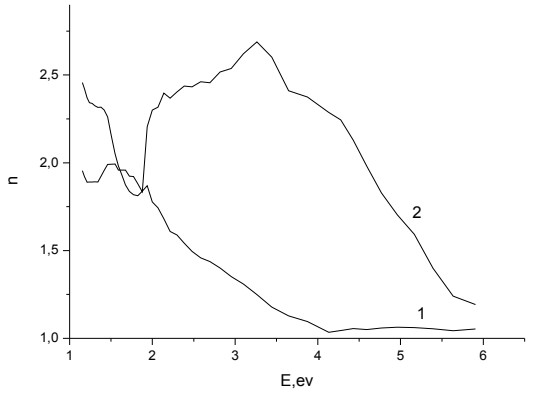


Рис.3.
Спектры показателя преломления n(E): $YbBi_2Te_4$ (кривая 1) и $YbBi_4Se_7$ (кривая2).

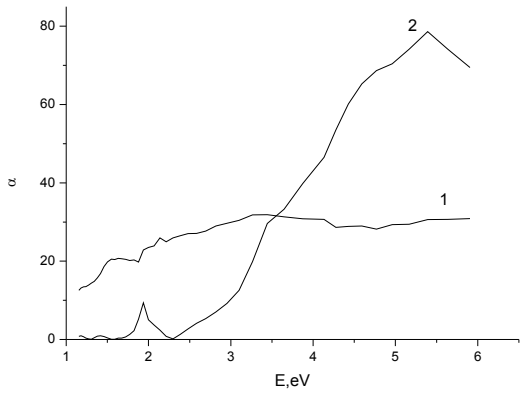


Рис.4.
Спектры поглощения α: $YbBi_2Te_4$ (кривая 1) и $YbBi_4Se_7$ (кривая 2).

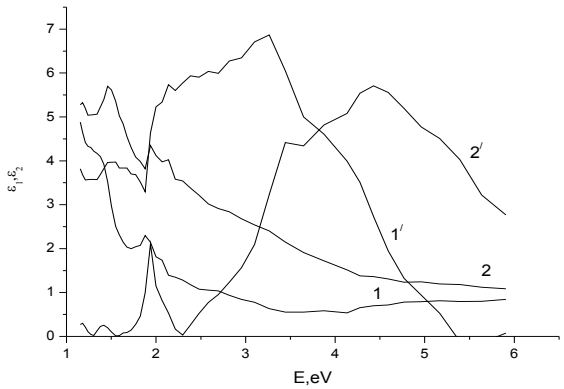


Рис.5.
Спектры диэлектрических проницаемостей ε_1 и ε_2: $YbBi_2Te_4$ (кривая 1 и 2) и $YbBi_4Se_7$ (кривая 1' и2').

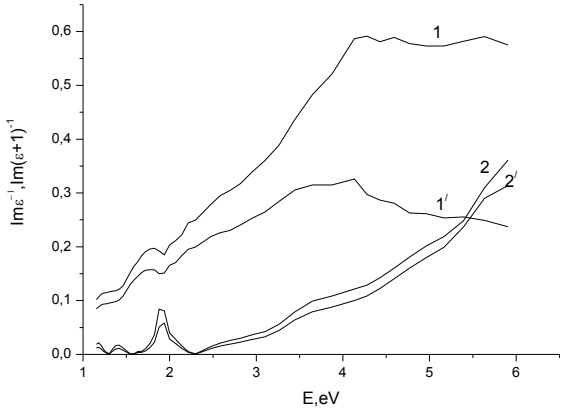


Рис.6.
Спектры функции объемных Img ε^{-1} и поверхностных Img$(1+\varepsilon)^{-1}$ потерь электронов: $YbBi_2Te_4$ (кривая 1 и 2) и $YbBi_4Se_7$ (кривая 1' и 2').

Как отмечается в [16], аналитические сингулярности мнимой части комплексной диэлектрической постоянной $\varepsilon_2(E)$ и функции, связанные плотностями состояний *dN*/*dE,* почти совпадают. Основной вклад в аналитическую сингулярность функции *dN*/*dE,* при этом, вносит градиент межзонных расстояний:

$$\frac{dN_{ij}}{dE} \sim \int \frac{dS_k}{\left|\nabla_k E_{ij}\right|} ,$$

где $E_{ij}(k)=E_j(k)-E_i(k)$ - расстояние между зоной проводимости и валентной зоной.

Теоретически из структуры зон могут быть рассчитаны значения *dN*/*dE* вблизи критических точек в *k*-пространстве, определяемые выражением $\left|\nabla_k E_{ij}\right|=0$, а также положение критических точек и тип переходов.

Анализ функции $\varepsilon_2(E)$, *dN*/*dE* и коэффициента отражения *R*(*E*) показывает, что расположение в спектре энергии и характер пиков одинаковы или весьма близки для этих параметров. Поэтому при помощи непосредственного сопоставления экспериментальных данных кривых отражения кристаллов в

области $E>E_g$ с теоретическими расчетами функции dN/dE можно определить величины соответствующих межзонных промежутков и природы зон.

Как отмечается в [17], одинаково пригодным для кристаллических и некристаллических веществ понятием является плотность состояний $N(E)$. По имеющимся результатам экспериментальных данных ход плотности состояний в некристаллическом теле не сильно отличается от соответствующего хода плотности состояний в кристалле. Тонкая структура в первом случае может быть смазана, и в запрещенной зоне могут появиться локальные состояния. Зонная структура при этом сохраняется и определяется ближним порядком атомов.

Как видно из Рис.1, коэффициенты отражения R(E) $YbBi_2Te_4$ (кривая 1) и $YbBi_4Se_7$ (кривая 2) по характеру изменения с энергией луча различаются. Коэффициенты отражения R(E) $YbBi_2Te_4$ (кривая 1) с ростом энергии уменьшаются, а для $YbBi_4Se_7$ (кривая 2) наблюдается рост коэффициента отражения. Это может объясняться отличием их электронной структуры, которая, в общем, зависит от состава, структуры и атомной структуры составляющей материала. Для $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$ аналогичные различия спектров наблюдаются и в их других параметрах (Рис.5 - Рис.6).

Таким образом, можно заключить, что характер изменения оптических параметров $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$ с энергией связан отличием их электронной структуры.

1. *Химия редких элементов. Хальколантанаты редких элементов. Москва, Наука*, (1989) 288.
2. Т.Ф.Максудова, *Физико-химические основы получения тройных соединений в системах Eu(Yb)-Sb(Bi)-X (X=S, Se, Te), Автореферат дисс. док.хим.наук, Баку,* (2005) 47.
3. П.Г.Рустамов, Т.Ф.Максудова, О.М.Алиев, *IV. Всес. конф. по тройным полупроводникам и их применению. Кишинев: ЩТИИНЦА* (1983) 45.
4. О.М.Алиев, *Физико-химические основы получения тройных полупроводниковых фаз, производной структуры Yb_3S_4 и Y_5S_7. Автореф. дисс. д-ра хим. наук. Свердловск: ИХ УНЦАН СССР,* (1985) 47.
5. О.М.Алиев, Т.Ф.Максудова, Н.Д.Самсонова, Л.Д.Финкельштейн, П.Г. Рустамов. *Неорган.материалы,* **XXII** (1986) 29.
6. Н.З.Джалилов, С.И.Мехтиева, Н.М.Абдуллаев, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXVII** №5 (2007) 114.
7. Н.З.Джалилов, С.И.Мехтиева, Н.М.Абдуллаев *Fizika,* **XIII** №4 (2007) 89.
8. Н.З.Джалилов, Г.М.Дамиров, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXIX** №5 (2009) 125.
9. Н.З.Джалилов, С.И.Мехтиева, Н.М.Абдуллаев, М.И.Велиев, II Украинская научная конференция по полупроводникам, (2004) 140.
10. Н.З.Джалилов, С.И.Мехтиева, Н.М.Абдуллаев, М.И.Велиев. *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy*, **XXIV** №5(I) (2004).
11. С.И.Мехтиева, Н.З.Джалилов, Н.М.Абдуллаев, Н.Р. Мамедов, *Доклады НАН Азерб.,* **LXIII** №4, (2007) 48.
12. Н.З.Джалилов, Н.М.Абдуллаев, Н.Р.Мамедов, *Аморфные и Микрокристаллические Полупроводники, Сб.трудов VI Межд. конф., Санкт-Петербург*, (2008) 238.
13. Н.З.Джалилов, Н.М.Абдуллаев, Н.Р.Мамедов, Г.М. Аскеров, *Fizika,* **XIV** №3 (2008) 144.

14. Н.З.Джалилов, Г.М.Дамиров, *Труды X Межд. конф. «Опто–наноэлектроника, нанотехнологии и микросистемы». Ульяновск*, (2008) 45.
15. Н.З.Джалилов, Г.М.Дамиров, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXVIII** №5, (2008) 134.
16. Н.Мотт, Э.Дэвис*, Электронные процессы в некристаллических веществах. Москва «Мир»,* (1982) 368.
17. К.К.Шварц, Ю.Н.Шунин, Я.А.Тетерис. *Изв. АН ЛатССР, сер. физ. и тех. наук,* №4 (1987) 51.

$YbBi_2Te_4$ VƏ $YbBi_4Se_7$ KRISTALLARININ OPTIK SPEKTRLƏRI

N.Z.CƏLİLOV, M.A.MAHMUDOVA

İşdə $YbBi_2Te_4$ və $YbBi_4Se_7$ polikristallik nümunələrində işıq enerjisinin 1÷6eV intervalında nümunələrin səthinə normal düşən işığın əksolunma əmsalı R(E) ölçülmüşdür. Ölçülən əksolunma əmsalının qiymətləri əsasında Kramers-Kroninq münasibətlərinin köməyi ilə onların optik parametrləri: udma əmsalı α, dielektrik nüfuzluğunun xəyali ε_2 və həqiqi ε_1 hissələri, udma *κ* və sındırma *n* əmsalları; həcmi -Img ε^{-1} və səthi -Img$(1+\varepsilon)^{-1}$ elektron itkiləri funksiyalarının xarakteristikaları təyin edilmişdir.

OPTICAL SPECTRA $YbBi_2Te_4$ AND $YbBi_4Se_7$

N.Z.DZHALILOV, M.A.MAHMUDOVA

Factors of reflexion R R(E) polycrystalline samples $YbBi_2Te_4$ and $YbBi_4Se_7$ in the range of energy of a beam 1÷6eV, falling normally on a surface have been measured. The optical parametres, such as absorption factor α on their basis by means of parities of Kramersa-Kroniga; imaginary ε_2 and real ε_1 parts of dielectric permeability; an absorption indicator κ and refractions n; function characteristic volume -Img ε^{-1} and superficial -Img$(1+\varepsilon)^{-1}$ losses electron have been defined.

Редактор: О.Тагиев

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ЯВЛЕНИЕ ГИСТЕРЕЗИСА В Ag_2Se И Ag_2Te ПРИ $\alpha \Leftrightarrow \beta$ ПЕРЕХОДЕ

Ф.Ф.АЛИЕВ, М.Б.ДЖАФАРОВ, А.А.САДДИНОВА, Н.А.ВЕРДИЕВА*

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33
*Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия**
AZ 1010, г.Баку, пр. Азадлыг, 20

В данной работе исследованы температурные зависимости электропроводности σ, коэффициента Холла R, термо ЭДС x_0 и приведен дифференциально-термический анализ ΔTy в кристаллах Ag_2Se и Ag_2Te при переходе α→β. На зависимостях σ(T), R(T), x_0(T) и ΔTy(T) наблюдается петля гистерезиса. Полученные данные интерпретированы на основе размытых фазовых превращений. Согласие экспериментальных данных с теорией достигается во втором приближении функции включения L(T) и ее производной по температуре dL_2/dT.

ВВЕДЕНИЕ

Исследованию электрофизических свойств в Ag_2Se и Ag_2Te в области структурного фазового перехода (СФП) посвящен ряд работ [1-9]. Подробные данные приведены в работах [5], в которых показано, что в Ag_2Se и Ag_2Te после основного ФП и перед ним наблюдаются дополнительные ФП, являющимся ФП типа смещения [4,9]. Установлено, что Ag_2Se и Ag_2Te ФП сильно размыты. Вычислены параметры ФП, определяющие область и степень размытия и.т.д. Несмотря на многочисленные работы по исследованию электрофизических свойств Ag_2Se и Ag_2Te, в том числе вблизи и в области ФП, интерпретация полученных результатов ограничивалась качественными рассуждениями. Поэтому в данной работе проводится анализ полученных данных σ(T), R(T), x_0 (T) и ΔTy(T) в Ag_2Se и Ag_2Te, измеренных в процессе нагрева или охлаждения (300÷550K).

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ МАСС ПРИ ФП. Определяя распределение масс каждой фазы в области ФП, можно выявить закон перехода одной фазы в другую, найти скорость ФП dL_0/dT и изменение некоторых термодинамических параметров. В работах [6-7] отмечается, что для выявления более общих свойств и характеристик закономерностей изменения физических свойств, происходящих в окрестности и в области ФП, необходимо исследовать и другие члены разложения функции F(T), определяющих функцию L. Различным приближениям L_n(T) соответствуют различные значения F_n(T)

$$L_n(T)=[1+\exp F_n(T)]^{-1}. \quad (1)$$

Поскольку результаты нулевого приближения были применены в [6] главе IV, здесь ограничимся рассмотрением первого и второго приближений (n=1u2). В общем случае L_1(T) имеет вид [6-7]

$$L_1=(1+\exp[a_0(T-T_0)^{\beta} + a_1 (T-T_0)^{\beta+1}])^{-1}. \quad (2)$$

Температура фазового перехода T_0 определяется из условия $L_1(T_0)=1/2$ или F(T)=0, что в данном случае приводит к решению уравнения

$$(T-T_0)^{\beta}[a_0 + a_1(T-T_0)]=0 \quad (3)$$

Корни этого уравнения соответствуют

$$T_{01}=T_0,\ T_{02}=T_{01}-\frac{a_0}{a_1}=T_0-\frac{a_0}{a_1} \quad (4)$$

Видно, что в этом случае имеются две температуры РФП: одна совпадает с T_0, вторая, в зависимости от знаков величин a_0 и a_1, смещается вправо и влево от T_0. Второй корень стремится к бесконечности при $\alpha_1 \to 0$. Разность температур между обеими точками ФП равна $\Delta T_0=T_{02}-T_{01}=-\frac{a_0}{a_1}$.

В случае РФП (β=1) F_1 (T) соответствует

$$F_1(T)= a_0(T-T_0)+ a_1(T-T_0)^2, \quad (5)$$

$$L_1(T)=\frac{1}{1+\exp(T-T_0)[a_0+a_1(T-T_0)]}, \quad (6)$$

$$\frac{dL_1}{dN}=\frac{a}{2[1+chF_1(T)]}\left[1+\frac{2a_1}{a_0}(T-T_0)\right]. \quad (7)$$

Во втором приближении для РФП

$$F_2(T)= (T-T_0)[a_0+a_1(T-T_0)+ a_2(T-T_0)^2] \quad (8)$$

$$L_2(T)=\frac{1}{1+\exp F_2(T)}, \quad (9)$$

$$\frac{dL_2}{dT}=\frac{a_0}{2[1+chF_2(T)]}\left[1+\frac{2a_1}{a_0}(T-T_0)+\frac{3a_2}{a_0}(T-T_0)^2\right], \quad (10)$$

здесь температура ФП определяется так же из условия $F_2(T)=0$, что дает

$$T_{02}=T_0-\frac{a_1}{2a_2}+\sqrt{\left(\frac{a_1}{2a_2}\right)^2-\frac{a_0}{a_2}}, \quad (11)$$

$$T_{03}=T_0-\frac{a_1}{2a_2}-\sqrt{\left(\frac{a_1}{2a_2}-\frac{a_0}{a_2}\right)}. \quad (12)$$

В формулах (11) и (12) представляют интерес вещественные корни, что накладывает ограничение на постоянные коэффициенты разложения a_0, a_1, a_2, согласно которому должно выполняться неравенство $a_1^2>4a_0 a_2$, имеющее место при $a_0>0$, $a_1>0$, $a_2>0$, откуда следует, что $T_{02}>T_0>T_{03}$. Отрицательное значение a_2 обеспечивает основное требование – асимптотическое свойство функции включения L. При $T<<T_0$ $L_2\to 0$ и при $T>>T_0$ $L_2\to 1$. Последние два корня (11) и (12) совпадают при $a_2=\frac{a_1^2}{4a_0}$ и равны

$$T_{02}=T_0-\frac{a_1}{2a_2}.$$

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Измерения проводились в трех сериях образцов Ag_2Te с избытком Te(0,1at%) и Ag(0,1at%) и Ag_2Se с избытком Se(0,1at%) и Ag(0,1at%).

Эксперименты были проведены на условиях (16) [8], позволяющих создавать адиабатические и изотермические условия.

На Рис.(1) представлена температурная зависимость σ(T) в Ag_2Se (*а*) и Ag_2Te(б) с избытком Ag при нагреве и охлаждении. Как видно, для обоих образцов при охлаждении кривые проходят ниже, чем при нагревании. С ростом времени кривые σ(T) подымаются вверх, при этом петля гистерезиса несколько сужается, а площадь ее почти остается постоянной. В обоих образцах в σ(T) при охлаждении обнаруживаются два четких скачка при ~380 и 350К (в Ag_2Se) и ~390 и 365К (в Ag_2Te), смешенных в сторону низких температур по сравнению со скачками σ при нагревании.

На Рис.2 для обоих образцов представлены кривые температурной зависимости ΔTy(T) (ДТА). Из рисунка видно, что на кривых ΔTy(T) так же наблюдается два ФП с выделением тепла. Температуры ФП ΔTy(T) при охлаждении совпадают с температурой ФП, наблюдаемых на σ(T). В обеих

зависимостях площадь верхнего пика меньше площади второго. Температура ФП T_0 первого пика на ~12К (в Ag_2Se) и ~15К (в Ag_2Te), чем T_0 при нагревании. Подобные явления наблюдается и на температурных зависимостях коэффициента Холла и термоэдс (Рис.3). как видно, температуры ФП при охлаждении совпадают с данными σ(T) и R(T), а площадь гистерезиса x_0 (T) в Ag_2Se больше, чем σ(T) и R(T). Аналогичные результаты были получены для образцов стехиометрического Ag_2Te.

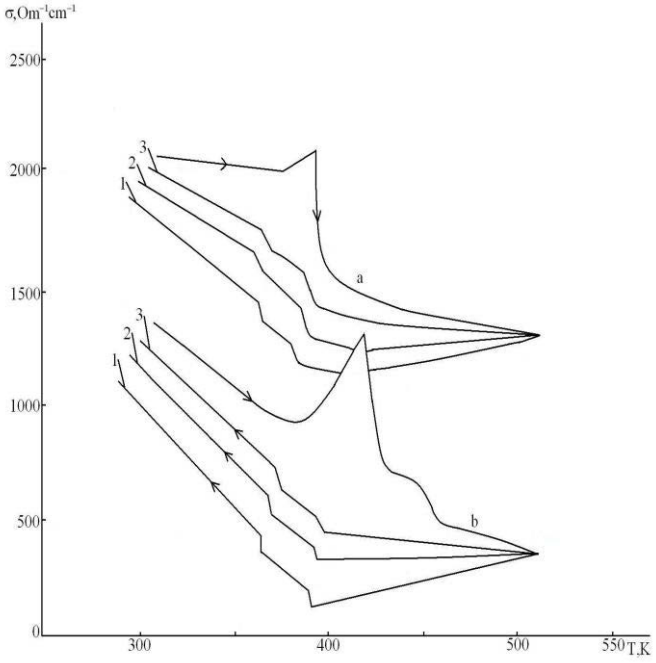


Рис.1.
Температурные зависимости электропроводимости σ(T) в Ag_2Se(a) и Ag_2Te (б). Время охлаждения, r; 1-3, 2-4, 3-6.

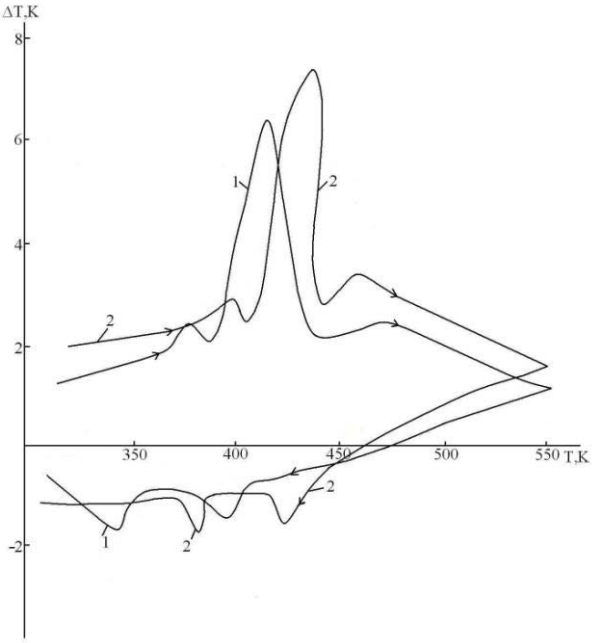


Рис.2.
Температурные зависимости ΔTy(T) в Ag_2Se(1) и Ag_2Te (2).

Для понимания данного факта можно использовать уравнение (6), (7), (9) и (10). Необходимо знать значение параметров в a_0, a_1, a_2 и T_0 конкретного кристалла. Для Ag_2Se и Ag_2Te a_0 и T_0 были определены в [4,9], a можно вычислить на основании представленных экспериментальных данных с использованием соотношений (4), a_2 оценивается из условии ограничения вещественности корней.

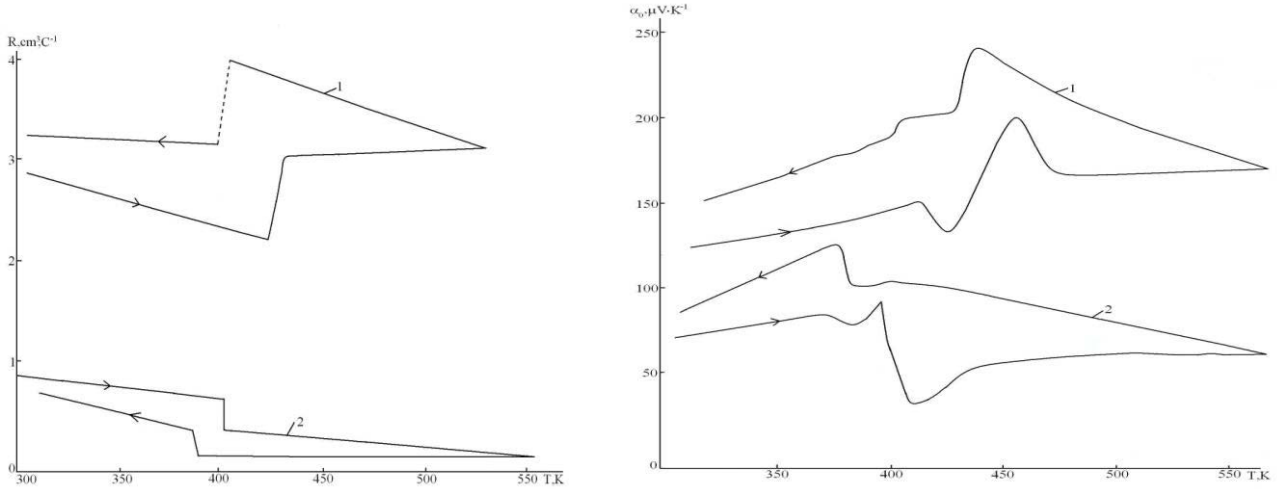


Рис.3.
Температурные зависимости коэффициента Холла R(T), термоэдс α_0(T) в Ag_2Te (1) и Ag_2Se (2).

На Рис.4 и Рис.5 представлены температурные зависимости $L_1(T)$, $L_2(T)$, dL_1/dT и dL_2/dT для Ag_2Te *(а)* и Ag_2Se *(б)*при полученных значениях a_0=0,42; a_1=0,03; a_2 = 0,01; T_0=412К для (Ag_2Te) и a_0=0,36; a_1=0,027; a_2 = 0,02; T_0=406К для (Ag_2Se). Для сравнения на Рис.4 и Рис.5 представлены и кривые $L_0(T)$ и dL_0/dT в нулевом приближении.

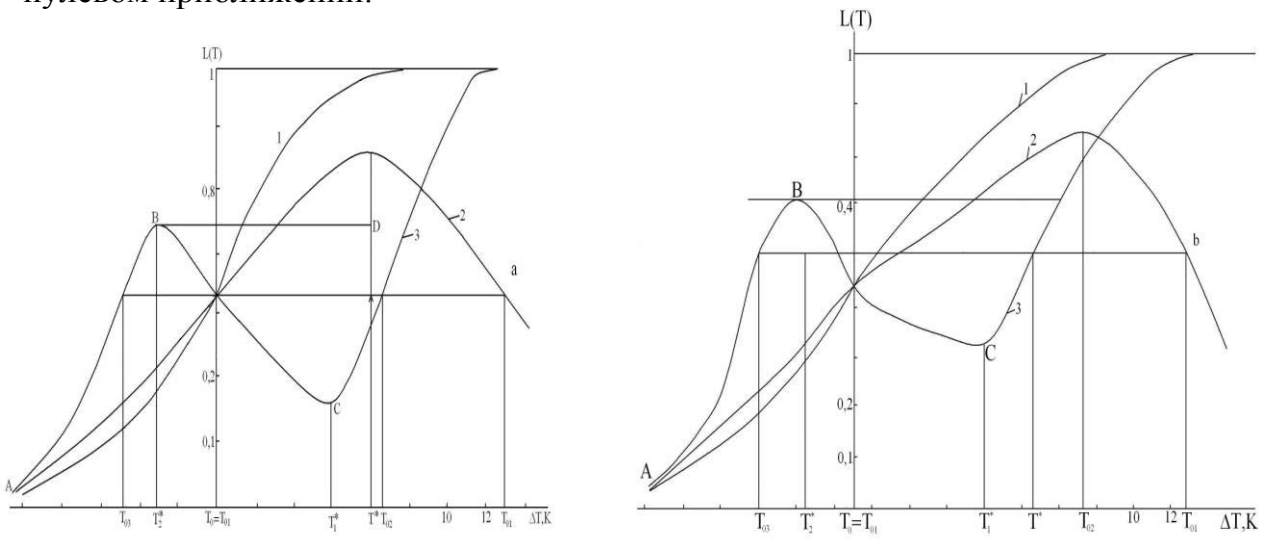


Рис.4.

Температурные зависимости функции включения L(T) рассчитанные по (5) и (7) для Ag_2Te (а) и Ag_2Se(б). 1- $L_0(T)$, 2- $L_1(T)$, 3-$L_2(T)$.

Видно, что $L_1(T)$ для обоих образцов сильно отличаются от $L_0(T)$. Экстремальные значения $L_1(T)$ достигаются при температуре $T^* = T_0 - \frac{\alpha_0}{3\alpha_1}$, которая находится между температурами размытия ФП ($T_{01}>T^*>T_{02}$). Согласно [6-7] физический смысл такого хода $L_1(T)$ может быть связан с существованием одной фазы в определенном интервале температур ($\Delta T = T_{02}-T_{01}$). Так как выявлен закон перехода α-фазы в β-фазу [4,9] и никакой области (ΔT) существования такой фазы в Ag_2Se и Ag_2Te в области ФП не имеется. Сведения о существовании таких областей (при ФП) имеются в работах по сегнетовым солям [7]. Конечно, в общем случае, необходимо проводить более подробные исследования. На Рис.(4) представлена температурная зависимость $L_2(T)$ обоих образцов. Экстремальные значения $L_2(T)$ соответствуют температурам

$$T_1^* = T_0 - \frac{a_1}{3a_2} + D \text{ и } T_2^* = T_0 - \frac{a_1}{3a_2} - D, \qquad (13)$$

где $D = \frac{1}{3a_1}\sqrt{a_1^2 - 3a_0a_2}$.

При выше приведенных значениях для обоих образцов a_0, a_1, a_2 для T_1^* и T_2^* удовлетворяют условия $T_1^* > T_0 > T_2^*$. По значениям T_1^* и T_2^* можно определить и функции $F_1(T_1^*)$ и $F_2(T_2^*)$. Расчеты показывают, что экстремальные значения $F_2(T_2^*)$ соответствует минимуму, а $F_2(T_2^*)$ максимуму $L_2(T_2)$.

Из Рис.(4) видно, что для обоих образцов имеет место асимметрии $L_2(T_2)$. Асимметрия ФП Ag_2Se и Ag_2Te появляются и на температурных зависимостях скорости ФП dL_1/dT и dL_2/dT (Рис.5). Из этих данных следует, что в размытых ФП максимум скорости ФП смещается от T_0 в сторону высоких температур и обладает большим значением, чем при dL_0/dT. На кривых dL_2/dT четко наблюдается

дополнительный фазовый переход с поглощением тепла. Асимметрия электрических и тепловых свойств Ag_2Se и Ag_2Te при ФП наблюдается и в эксперименте, особенно вне области размытия ФП [4]. Все это говорит в пользу того, что при более высоких приближениях в функции включения проявляется тонкая структура размытых ФП.

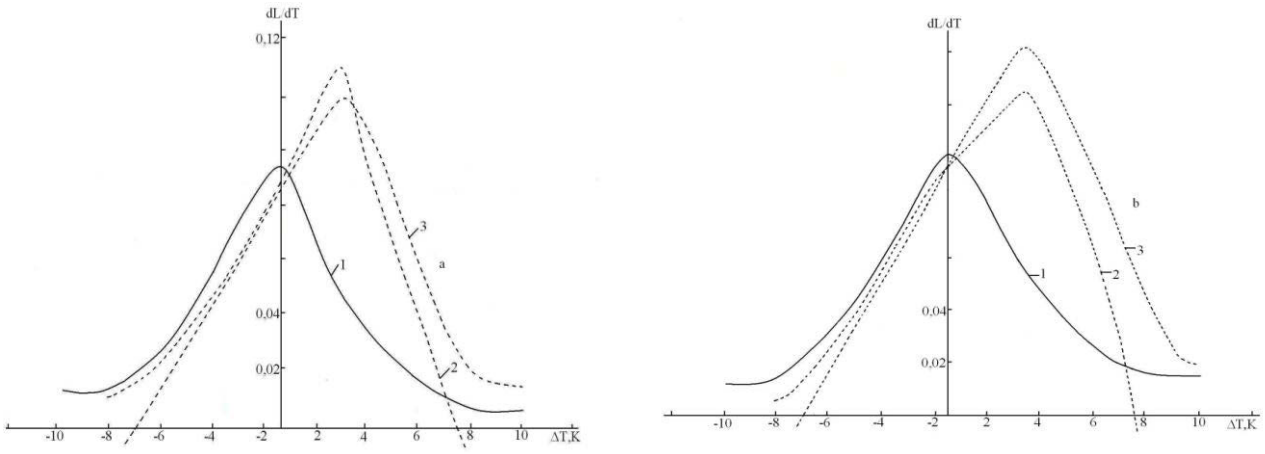


Рис.5.

Температурная зависимость скорости ФП, рассчитанная по (6) и (8) для Ag_2Se(а) и Ag_2Te (б).1- dL_0/dT,2- dL_1/dT,3- dL_2/dT.

Физический анализ $L_2(T)$ дается в работе [7], согласно которому один из возможных вариантов состоит в том, что новая фаза возникает в области СД. В [4] считают, что такой случай является маловероятным, хотя и возможным при наличии нескольких переходов, расположенных достаточно близко друг от друга на температурной оси. Однако более реальный случай может быть связан с тем, что область ВС соответствует некоторому метастабильному состоянию системы в определенном интервале температур. Тогда, проводя прямые ВД и АС, получаем петлю гистерезиса АВСД ширина, которой определяется как

$$h = T_{03} - T_{02} = 2\sqrt{\left(\frac{a_1}{2a_2}\right)^2 - \frac{a_0}{a_2}} \qquad (14)$$

Из Рис.4 следует, что гистерезис может иметь место только в случае, когда $a_1^2 \rangle 4a_0a_2$. Исходя из экспериментальных, данных можно сказать, что оба варианта интерпретации не только могут быть применены к Ag_2Se и Ag_2Te, но даже дополняют друг друга, поскольку действительно обнаружены ФП [4,9], расположенные достаточно близко на температурной оси, а так же имеет место явление гистерезиса электрических и тепловых свойств. Заметим, что расчетные и экспериментальные значения T_{02} и T_{03} хорошо согласуются, а ширина петли гистерезиса в эксперименте для некоторых кинетических коэффициентов больше, чем рассчитанная (h =14K в Ag_2Te и h =12K в Ag_2Se) по формуле (14), это можно было ожидать, поскольку в реальных случаях на площадь петли гистерезиса оказывают влияние такие факторы, как длительность охлаждения, степень адиобатической изотермичности условий эксперимента, потери энергии по монтажным проводам и др.

Дополнительные сведения о явлении гистерезиса при ФП можно получить из расчета количества тепла, выделяемого или поглощаемого при ФП в направлении нагрева и охлаждения. Это можно произвести по данным ΔTy(T) в области ФП по формуле [4]

$$Q = \frac{khbm}{vm}, \qquad (15)$$

где h и b высота и ширина пиков на половине максимумов (или минимумов), M-молекулярная масса, v - скорость нагрева. Для анализированного образца получено: в направлении нагрева с массой m=0,818 и скоростью нагрева (или охлаждения) v=1,2к/мин получено $Q_{318к}$=7,2C, $Q_{384к}$=1,3C, $Q_{395к}$=17,9C и $Q_{405к}$=0,8C, а при охлаждении $Q_{400к}$=20,1C, $Q_{390к}$=2,7C и $Q_{315к}$ =4,3C в Ag_2Se, а в Ag_2Te где m =0,65г и P=1,3 к/мин в направлении нагрева $Q_{408к}$=2C, $Q_{415к}$=20C, $Q_{425к}$=1,3C при охлаждении $Q_{400к}$=2,2C и $Q_{380к}$=5,6C.

Как видно, тепло в обоих образцах поглощаемое при основном структурном ФП ($\alpha^1 \rightarrow \beta^1$) в 6÷8 раз больше чем теплота, выделяемая при сопутствующих $\alpha \rightarrow \alpha^1$ и $\beta^1 \rightarrow$ФП. Следует обратить внимание на то, что сумма изменяющейся части внутренней энергии кристалла в направлении нагрева примерно в 3 раза больше чем в направлении охлаждения. Эти особенности можно объяснить так: при медленном прохождении области ФП значительно уменьшается площадь гистерезиса (Рис.1- Рис.5). Наблюдается большая площадь гистерезиса на кривых ΔTy(T). Это подтверждает то, что переход $\alpha \rightarrow \beta$ происходит через промежуточную фазу, и она является как бы местом для перестройки решетки $\alpha \rightarrow \beta$. Обычно гистерезис термограммы или кривых температурной зависимости свойств материала обусловлен несоразмерной фазой [10]. Особенностью несоразмерной фазы является температурный гистерезис физических характеристик при циклическом изменении температуры.

Природа гистерезиса, по–видимому, связана с возможностью закрепления волны пространственной модуляции несоразмерной фазы на неоднородностях кристалла, хотя определенный вклад в закрепление вносит и дискретность решетки [11]. Это приводит к запаздыванию изменения структуры и свойств несоразмерной фазы при изменении температуры.

Итак, весь комплекс экспериментальных исследований Ag_2Se и Ag_2Te позволяет сделать вывод о том, что в них $\alpha \rightarrow \beta$ переход сопровождаются последовательной сменой структур проходящих через несоразмеримое состояние.

1. Ф.Ф.Алиев, *ФТП*, **37** (2003) 1082.
2. С.А.Алиев, Ф.Ф.Алиев, Г.П.Пашаев, *Неорган. Матер.,* **29** (1993) 1073.
3. С.А.Алиев, Ф.Ф.Алиев, *Неорган. Матер.,* **25** (1989) 241.
4. С.А.Алиев, Ф.Ф.Алиев, З.С.Гасанов, *ФТТ*, **40** (1998) 1693.
5. С.А.Алиев, Ф.Ф.Алиев, *ФТП,* **42** (2008) 830.
6. Б.Н.Ролов, *Размытые фазовые переходы. Рига*, (1972) 311.
7. Б.Н.Ролов, В.Э.Юркевич, *Физика размытых фазовых переходов. Изд. Ростов. Университета,* (1983) 319.
8. С.А.Алиев, Д.Г.Араслы, З.Ф.Агаев, Ш.С.Исмаилов, Э.И.Зульфигаров, *Изв. АН Азерб.ССР. Сер. Физ.тех. и мат.*, **6** (1982) 67.
9. Ф.Ф.Алиев, Б.А.Таиров, А.Ф.Гулиев, Т.Ф.Юсифова, *Акад. Həsən Abdullayevin 85-illik yubileyi, Bakı,* (2003) 158.
10. С.А.Гриднев, *Сегнето-электрические кристаллы с несоразмерными фазами. Современным естествознание, М.*, (2000) 381.
11. K.Hamano, Y.Ikeda, T.Fujimoto, K.Ema, Sh.Hirotsu, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **49** (1980) 2278.

Ag_2Se və Ag_2Te KRISTALLARININ $\alpha \Leftrightarrow \beta$ KEÇIDLƏRINDƏ HISTEREZIS HADISƏSI

F.F.ƏLIYEV, M.B.CƏFƏROV, A.A.SƏDDINOVA, N.A.VERDIYEVA

Təqdim olunan işdə Ag_2Se və Ag_2Te kristallarının $\alpha \Leftrightarrow \beta$ keçidlərində elektrikkeçirmənin (σ), Holl əmsalının (R), termo e.h.q. (α_0) temperatur asılılıqları tədqiq olunmuş və differensial termik analiz (ΔTy) aparılmışdır. σ(T), R(T), α_0(T) və ΔTy(T) asılılıqlarında böyük sahəli histerezis ilgəyi müşahidə olunmuşdur. Alınan eksperimental nəticələr yayılan faza keçidləri nəzəriyyəsi əsasında izah olunublar. Eksperimental və nəzəri nəticələr daxilolma funksiyasının ikinci yaxınlaşması (L_2(T)) və onun temperatura görə törəməsini (dL_2/dT) nəzərə aldıqda izah oluna bilər.

HYSTERESIS AT $\alpha \Leftrightarrow \beta$ TRANSITION IN Ag_2Se and Ag_2Te

F.F.ALIEV, M.B.JAFAROV, A.A.SADDINOVA, N.A.VERDIYEVA

The temperature dependence of σ electric conductivity, Hall-effect constant R, thermal electric power α_0 as well as differential and thermal analysis ΔT_y in crystals Ag_2Se, Ag_2Te at $\alpha \Leftrightarrow \beta$ transition have been studied. A big hysteresis loop has been observed within 5 (T), R (T), α_0 (T) and ΔT_y(T) dependences. The obtained datahave been interpreted as per fuzzy phase transformation. Conformity of experiment data and theory has been obtained in second approximation of inclusion function L_2(T) and its temperature derivatives dL_0/dT.

Редактор: Дж.Исмайлов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

МЕТОД ИЗМЕРЕНИЙ ЭНЕРГИИ И МОЩНОСТИ КОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ МОНОХРОМАТИЧЕСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

А.А.АЛИЕВ, Н.Д.ИСМАЙЛОВ, Ш.М.КУЛИЕВ, А.К.МАМЕДОВ, Р.И.МУХТАРОВА

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 143, Баку, пр. Г.Джавида, 33

Предложен метод измерений энергии и мощности коротких импульсов монохроматического излучения ИК-диапазона с помощью фотоприемника, состоящего из быстродействующего малоразмерного фоторезистора на основе p-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ (x = 0,2÷0,3), работающего в режиме пролета, и высокочувствительного фоторезистора большой площади на основе n-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ того же состава. Показано, что данный метод позволяет провести абсолютные измерения параметров излучения, а применение соответствующей оптической системы и измерительной схемы - одновременное определение энергии и мощности одиночных оптических импульсов.

Развитие инфракрасной техники, физической электроники и других областей науки и техники выдвинуло целый ряд новых проблем измерения параметров оптического излучения, а появление лазеров, резко расширив диапазон измеряемых потоков излучения, потребовало создания новых средств энергетической фотометрии.

В среднем и дальнем ИК-диапазоне спектра наиболее распространенным методом измерения энергии и максимальной мощности импульсного монохроматического излучения является осциллографический метод, основанный на преобразовании оптического сигнала в электрический с помощью линейного малоинерционного фотодетектора и воспроизведении формы импульса измеряемого излучения на экране осциллографа [1-3]. При абсолютной калибровке фотодетектора максимальное (пиковое) значение сигнала на экране осциллографа соответствует пиковой мощности измеряемого оптического импульса, а площадь, занимаемая осциллограммой, его энергии.

В указанном диапазоне спектра наиболее высокое быстродействие достигается в фотодиодах и пролетных фоторезисторах на основе $Hg_{1-x}Cd_xTe$ (x=0,2÷0,3). Однако высокое быстродействие этих фотодетекторов достигается благодаря слишком малым для фотометрических систем размерам приемной площадки (10^{-3}÷10^{-4}cm^2), что вносит дополнительные погрешности при абсолютных измерениях параметров излучения.

Указанный недостаток можно устранить с помощью фотоприемника, содержащего на посадочной поверхности два фоточувствительных элемента – быстродействующий малоразмерный фоторезистор на основе p-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ (x=0,2÷0,3), работающий в режиме пролета, и высокочувствительный фоторезистор с большей приемной площадкой (например, в пределах 1÷10мм^2) на основе n-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ того же состава. Постоянная времени фоторезисторов на основе n-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ (x=0,2÷0,3) с концентрацией электронов n=(1÷5)10^{14}см$^{-3}$ находится в пределах τ_1=(1÷20)10^{-6}с. Для повышения чувствительности фотоприемная площадка этого фоторезистора может быть выполнена в конструкции типа меандра. Быстродействие малоразмерных (0.1x0.1мм^2) фоторезисторов на основе p-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ определяется временем пролета неосновных носителей к контакту и может достигать значений $\tau_2 \leq 10^{-9}$с [4-6]. Таким образом, предлагаемый фотоприемник состоит из двух детекторов с одинаковым спектральным диапазоном чувствительности, но резко различающихся по быстродействию. Фотоприемник предназначен для измерений энергетических параметров импульсов излучения, длительностью $\tau_2 < \Delta t_p < \tau_1$.

БАЗОВЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Общее выражение для фототока в слабом электрическом поле ($\mu_a E\tau<L$), когда эффектами эксклюзии (вытягивания неосновных носителей полем из объема) можно пренебречь имеет вид

$$J_{s\lambda} = \eta_\lambda \frac{\lambda}{hc} q(1+b)\frac{\mu_p \tau}{L^2} U_b P_\lambda \equiv S_{i\lambda} P_\lambda , \qquad (1)$$

где P_λ – мощность падающего монохроматического излучения, $S_{i\lambda}$ – токовая (ампер-ваттная) монохроматическая чувствительность фоторезистора, $b = \mu_e/\mu_h$ – соотношение подвижностей электронов и дырок .

Начальное (пиковое) значение фототока при падении на приемную площадку фоторезистора импульса монохроматического излучения с энергией W_λ, соответствующей линейному участку его энергетической характеристики, и длительностью t_p значительно меньшей времени жизни неосновных носителей заряда ($t_p << \tau$), определяется выражением

$$\delta J_{\max} \approx \eta_\lambda \frac{\lambda}{hc} q(1+b)\frac{\mu_p}{L^2} U_b W_\lambda . \qquad (2)$$

Из (1) и (2) следует, что

$$\delta J_{\max} \approx \frac{S_{i\lambda}}{\tau} W_\lambda , \qquad (3)$$

т.е. когда рекомбинацией носителей заряда за время воздействия импульса излучения можно пренебречь, максимальное (пиковое) значение фототока пропорционально полной энергии падающего импульса излучения, а коэффициент пропорциональности равен отношению монохроматической токовой чувствительности фоторезистора на длине волны измеряемого импульса излучения к стационарному времени жизни носителей заряда.

В случае сильного электрического поля ($\mu_a E\tau>>L$) выражение для фототока принимает вид

$$J_{s\max} = \frac{1}{2}\eta_\lambda \frac{\lambda}{hc} q(1+b)\frac{\mu_p}{\mu_a} P_\lambda \equiv S_{i\max} P_\lambda , \qquad (4)$$

где J_{smax} - не зависящая от напряжения смещения токовая чувствительность фоторезистора в режиме полной эксклюзии.

Соответственно монохроматическая вольтовая чувствительность фоторезистора в режиме пролета может быть записана в виде

$$S_{u\max} = \frac{1}{2}\eta_\lambda \frac{\lambda}{hc} q(1+b)\frac{\mu_p}{\mu_a} R_d , \qquad (5)$$

где R_d – темновое сопротивление фоторезистора.

Таким образом, выходной сигнал фоторезистора в режиме пролета не зависит от приложенного напряжения и, в достаточно широком интервале, пропорционален мощности падающего излучения, что создает преимущество при абсолютных измерениях мощности монохроматического излучения.

ОПИСАНИЕ МЕТОДА

Измерения проводятся следующим образом. Каждый из фотодетекторов в отдельности включается в измерительную схему известными способами. Импульс монохроматического ИК-излучения, длительность которого $\Delta t_p < \tau_1$, направляют на приемную площадку высокочувствительного фоторезистора. Сигнал фоторезистора подают на осциллограф. При условии $\Delta t_p<\tau_1$ измерительная система реагирует на энергию оптического импульса, а реакция фоторезистора на импульс излучения

короткой длительности представляет собой импульсную характеристику самого фоторезистора.

В случае низкого уровня оптического возбуждения (т.е. в области линейности энергетической характеристики фоторезистора в импульсном режиме) и при условии $\Delta t_p<\tau_1$ между пиковым значением фототока и энергией измеряемого импульса излучения имеет место вышеприведенное соотношение (3). При этом релаксация фототока происходит по экспоненциальному закону.

В случае необходимости с помощью калиброванных ослабителей можно снизить интенсивность падающего излучения до уровня, лежащего в области линейности энергетической характеристики фоторезистора. По форме импульсной характеристики на экране осциллографа определяется пиковое значение фототока и постоянная времени τ_1, которая в условиях измерений соответствует стационарному времени жизни неравновесных носителей заряда, и, зная монохроматическую токовую чувствительность в непрерывном режиме на длине волны измеряемого импульса излучения, определенную известными методами из соотношения (3), можно рассчитать энергию импульса излучения, падающего на фотоприемную площадку

$$W_\lambda = k\delta J \frac{\tau_1}{S_{i\lambda}}, \tag{6}$$

где k – коэффициент ослабления оптической системы.

Далее, измеряемое излучение направляется на быстродействующий фоторезистор. Сигнал фоторезистора подается на осциллограф. При условии $\tau_2<\Delta t_p$ фотодетектор реагирует на мощность оптического импульса, а электрический сигнал детектора воспроизводит форму импульса излучения. Временное разрешение регистрирующей аппаратуры при этом должно быть достаточным для отображения оптического импульса без искажений. По форме импульса излучения на экране осциллографа определяется его длительность по уровню 0,5 от максимального значения. Измерение мгновенной мощности импульсного излучения может быть проведено путем раздельного определения формы (осциллографированием сигнала малоинерционного фоторезистора) и энергии оптического импульса. Если отклонение луча на экране осциллографа $y(t)=a\ P_\lambda(t)$, где a - постоянный коэффициент, определяемый чувствительностью фотодетектора и осциллографа, то площадь, занимаемая осциллограммой

$$F = \int_0^{\Delta t} y(t)dt = a\int_0^{\Delta t} P_\lambda(t)dt = aW_\lambda, \tag{7}$$

отсюда можно получить выражение для определения мощности оптического импульса во времени

$$P_\lambda = y(t)\frac{W_\lambda}{\int_0^{\Delta t} y(t)dt}. \tag{8}$$

Если возникает необходимость одновременного измерения энергии и мощности оптического импульса (например неповторяющихся одиночных импульсов), то можно применить оптическую систему, расщепляющую луч в известной пропорции для одновременной засветки обоих приемных площадок. В этом случае применение двухлучевого осциллографа в измерительной схеме позволяет провести одновременные измерения мощности и энергии импульса оптического излучения по вышеприведенной методике.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, предложенный фотоэлектрический метод с использованием фотоприемника, содержащего на посадочной поверхности два фоточувствительных элемента – быстродействующий малоразмерный фоторезистор на основе монокристаллов p-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ (x=0,2÷0,3), работающий в режиме пролета, и высокочувствительный фоторезистор с большей приемной площадкой на основе n-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ того же состава позволяет путем осциллографирования провести абсолютные измерения полной энергии и максимальной мощности импульсного монохроматического ИК-излучения, в том числе, и максимальное значение.

1. Г.Хирд, *Измерение лазерных параметров, М., «Мир»*, (1970) 539.
2. *Измерение энергетических параметров и характеристик лазерного излучения*, под ред. А.Ф.Котюка, М., «Радио и связь», 1981
3. А.А.Волькенштейн, Э.В.Кувалдин, *Фотоэлектрическая импульсная фотометрия, Л., Машиностроение,* (1975) 192.
4. Г.Г.Ишанин, Э.Д.Панков, Источники и приемники излучения, Санкт-Петербург, Политехника, (1991) гл. 4.
5. A.Rogalski, *HgCdTe infrared detector material: history, status and outlook. Rep. Prog. Phys.,* **68** (2005) 2267.
6. А.А.Алиев, Ш.М.Кулиев, А.К.Мамедов, *Приборы и техника эксперимента*, №1 (2004) 162.

MONOXROMATİK ŞÜALANMANIN QISA İMPULSLARININ ENERJİSİNİN VƏ GÜCÜNÜN ÖLÇÜLMƏSİ METODU

Ə.Ə.ƏLİYEV, N.C.İSMAYILOV, Ş.M.QULİYEV, A.K.MƏMMƏDOV, R.İ.MUXTAROVA

p-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ (x=0,2÷0,3) əsaslı çevik kiçik ölçülü və həmin tərkibli n-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ əsaslı yüksək həssaslı böyük ölçülü fotorezistorlardan ibarət fotoqəbuledicidən istifadə etməklə İQ-diapazonunda monoxromatik şüalanmanın qısa impulsların enerjisinin və gücünün ölçülməsi metodu təklif olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, bu metod şüalanmanın parametrlərinin mütləq ölçmələrini, müvafiq optik sistem və elektrik ölçmə sxemi tətbiq edildikdə isə, tək optik impusların eyni zamanda enerjisinin və gücünün ölçülməsini aparmaq imkan verir.

THE METHOD FOR MEASURING ENERGY AND POWER OF SHORT PULSES MONOCHROMATIC RADIATION

A.A.ALIYEV, N.D.ISMAYLOV, Sh.M.KULIYEV, A.K.MAMEDOV, R.I.MUKHTAROVA

The method for measuring energy and power of short pulses IR monochromatic radiation using a photodetector, consisting of a high-speed small-size sweep-out photoresistor, based on p-$Hg_{1-x}Cd_xTe$ (x = 0,2 ÷ 0,3), and a high-sensitive large-size photoresistor on the basis of the same composition n-Hg1-xCdxTe has been offered. It has been shown that this method allows for absolute measurement of radiation parameter's, and the use of appropriate optical system and measuring circuit, the simultaneous determination of energy and power of single optical pulses.

Редактор: Б.Бархалов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ПОЛИМОРФНЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В МОНОКРИСТАЛЛАХ $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$

А.Ф.ХАЗИЕВА, В.И.НАСИРОВ, Ю.Г.АСАДОВ, Ю.И.АЛЫЕВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г. Баку, пр. Г. Джавида, 33

Методом оптической микроскопии была исследована морфология роста кристаллов IV, III, II, I модификаций при полиморфных превращениях IV↔III↔II↔I в $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$. Определены температуры равновесия между IV и III, III и II, II и I фазами исследуемого кристалла. Установлено, что превращения идут по типу монокристалл↔монокристалл и происходят с образованием и ростом зародышей новых кристаллов внутри матричных.

Известно, что в интервале температур от комнатной до температуры плавления ($T_{пл}$=587К) у нитрата рубидия установлены четыре различные модификации. При комнатной температуре IV-модификация имеет орторомбическую решетку с симметрией $P3_1$ [1]. При температуре T>437К орторомбическая модификация превращается в кубическую III-модификацию с симметрией Fm3m [2]. При температуре T>492К III-кубическая модификация превращается в ромбоэдрическую II-модификацию с симметрией R3m [3] и при T>564К эта модификация, в свою очередь, превращается в кубическую I-модификацию с симметрией Fm3m [4]. Превращения IV↔III↔II↔I относятся к числу энантиотропных.

Нитрат цезия при комнатной температуре кристаллизуется в ромбической псевдотригональной сингонии с симметрией P3/m (II-модификация) [5], и эта модификация T>434К превращается в кубическую I-модификацию с симметрией Pa3 [6]. Превращение II→I в нитрате цезия также относится к числу энантиотропных.

На основании полученных данных о морфологии и кинетике полиморфных превращений в нитратах рубидия и цезия выявлено существование новой x-модификации и установлена общность механизма роста кристалла новой модификации внутри матричного [7, 8].

Исследования твердых растворов нитрата цезия в нитрате рубидия показывают, что I и II фазы исчезают из твердых растворов при концентрации соли цезия ~25мол% [9].

Как происходит рост кристаллов при полиморфных превращениях в твердых растворах нитрата цезия в нитрате рубидия?

Настоящая работа является продолжением серии работ [10,11], запланированных нами для того, чтобы ответить на этот вопрос и посвящена исследованию морфологии роста кристаллов при превращении IV↔III↔II↔I в $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$.

Монокристаллы IV-модификации $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ были получены из водного раствора при комнатной температуре. Для совершенства и чистоты полученных монокристаллов нитраты рубидия и цезия марки «ХЧ» подвергались дополнительной очистке путем многократной кристаллизации. Полученные хорошо ограненные кристаллы имели разнообразные внешние формы. Нами использованы монокристаллы, имеющие форму плоской пластинки или игл, натянутых в кристаллографическом направлении [001] матричного кристалла размерами в среднем 1x0.5x5мм. Исследования проведены методом оптической микроскопии, предложенным в [11].

На нагревательном столике микроскопа, обеспечивающем полное термостатирование исследуемых образцов, прежде всего тщательно измерены

температуры равновесия IV и III фаз (T_0=394К), III и II фаз (T_0=422К) и II и I фаз (T_0=498К). Температура кристаллов измерялась термопарой, спайка которой непосредственно касалась поверхности образцов. Точность измерения температуры при 100К составляла ~±1К.

1. Проведенные наблюдения под оптическим микроскопом за ростом кристаллов при полиморфных превращениях IV↔III в $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ показывают, что при температуре $T_{пр}>T_0$ рост дочерней модификации происходит с образованием и ростом зародыша данной модификации. Зародыш III-модификации, образовавшийся в невидимой под оптическим микроскопом области кристалла IV-модификации, растет со своими собственными огранками (Рис.1, фото 2, 3).

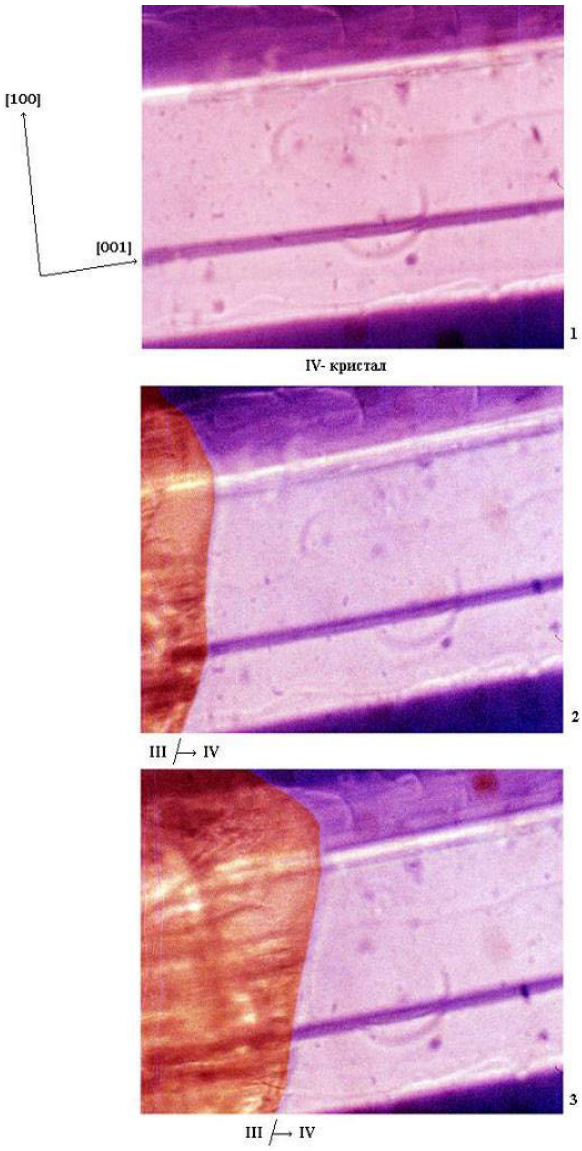


Рис.1.
Микрофотографии последовательной стадии роста кристалла III-модификации при превращении IV→III в $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$. Фото 1 - кристалл IV-модификации, фото 2 и 3- рост кристаллов III-модификации при превращении IV→III. Ув.90^x.

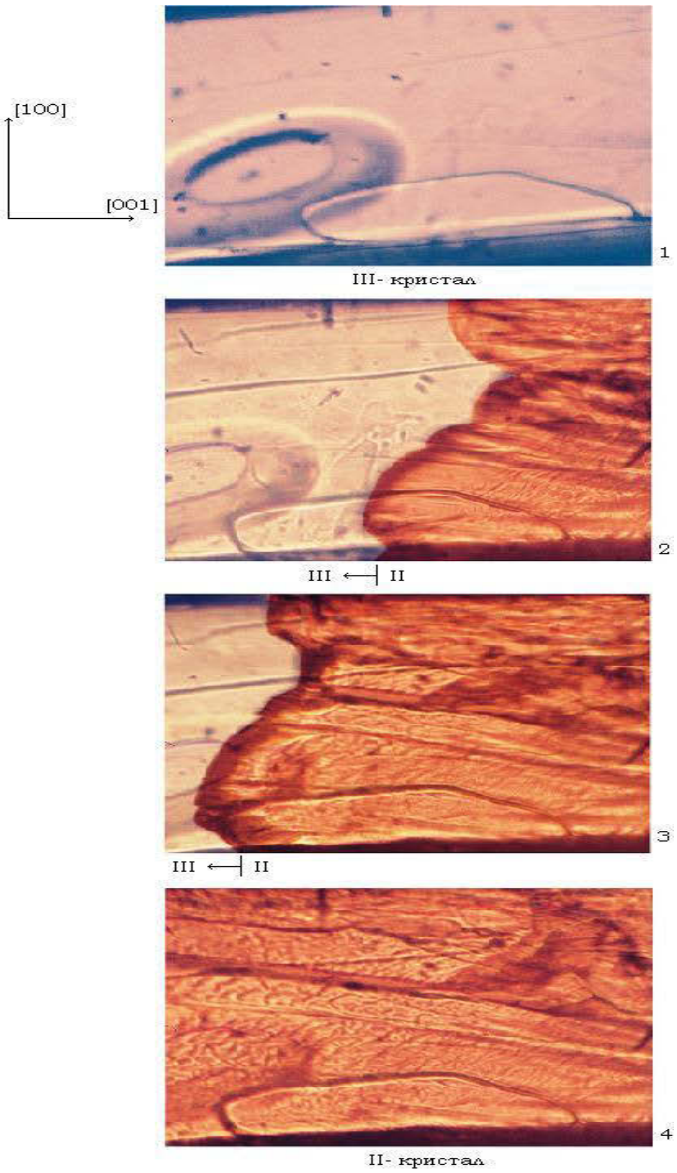


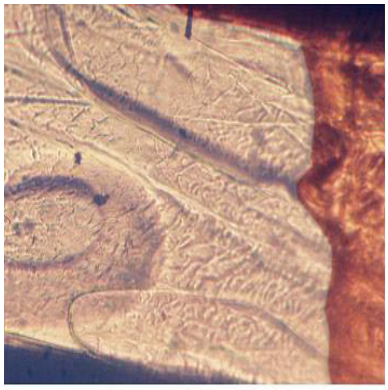
Рис.2.
Рост кристаллов II-модификации при превращении III→II в $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$. Фото 1- III- кристалл, фото 2 и 3- рост кристаллов II-модификации при превращении III→II, фото 4- кристалл II-модификации. Ув.90^x.

При температуре $T_{пр}<T_0$ происходит обратный переход, т.е. III→IV превращения. В результате этого перехода внутри монокристалла III-модификации растет кристалл IV-модификации. В обоих переходах температура задержки ΔT составляла примерно ~±1К. Здесь $\Delta T=T_{пр}-T_0$, где $T_{пр}$- температура превращения, T_0-температура равновесия. Зародыши дочерней модификации сначала растут по кристаллографическому направлению [100] матричного кристалла, когда рост по этому направлению прекращается, т.е. достигает другой границы матричного кристалла, начинается медленный рост по направлению [001] матричного кристалла. Многочисленные наблюдения показывают, что промежуточная x-модификация, обнаруженная между IV и III модификациями нитрата рубидия, в данном случае не обнаруживается.

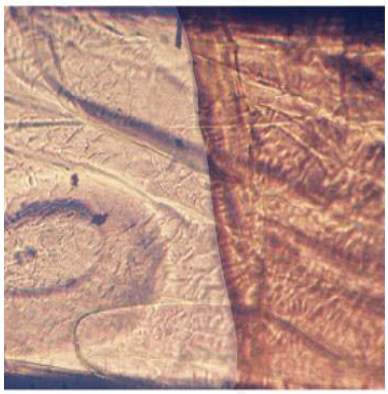
2. В монокристаллах $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ выше температуры равновесия III и II фаз происходит III→II превращение. Значение ΔT в данном случае составляла примерно ~±1 К. Рост кристаллов II-модификации при превращении III→II имеет разнообразную морфологию. Одна из них представлена на Рис.2(фото 2, 3), где в процессе превращения граница раздела II и III фаз за счет внутренних напряжений и поверхностных дефектов искривляется. В результате III→II превращения образуются линии деформации, которые почти параллельны между собой и перпендикулярны границе раздела фаз, и на местах этих линий граница раздела фаз искривлена. А сама граница раздела фаз двигается по кристаллографическому направлению [001] матричного кристалла. После полного III→II превращения линии деформации за счет релаксационных процессов исчезают. Аналогичная морфология наблюдается при IV→III превращении в $Rb_{0.95}Cs_{0.05}NO_3$ [11]. И еще отметим, что в данном случае эллипсообразный дефект не влияет на форму границы раздела фаз (Рис.2, фото 3).
3. При температуре $T_{пр}>498$К происходит II→I превращение. Оно также происходит без задержки (ΔT~±1К) с образованием и ростом зародыша дочерней модификации внутри матричного и сопровождается движением линейной границы II и I фаз в направлении [001] матричного кристалла (Рис.3, фото 1,2). Как видно из Рис.3(фото 2) в дефектном месте кристалла II-модификации граница раздела I и II фаз искривлена. В процессе превращения эта граница получает прямолинейную форму и составляет примерно 80° с направлением [001] матричного кристалла.
4. При температуре $T_{пр}<498$К (ΔT~±1К) происходит обратное, т.е. I→II превращение. Зародыш кристалла II-модификации, образованный в левом верхнем углу I кристалла растет со своими собственными огранками (Рис.4, фото 1). Эти огранки оставляли заметные и параллельные между собой следы, напоминающие ламелей при ритмическом росте. В процессе превращения угол между следами границы и кристаллографическим направлением [001] матричного кристалла увеличивается от 30° до 40° (Рис.4, фото 2).

   После полного I→II превращения эти следы границы за счет релаксационных процессов полностью снимаются (Рис.5, фото 1), и при $T_{пр}<422$К происходит III→II превращение. Как видно из рисунка, кристалл III-модификации начинает расти в дефектном месте II кристалла. За счет накопленных в результате предыдущих превращений внутренних напряжений кристалла, эта граница искривлена. Из сравнения Рис.2(фото 3) и Рис.5(фото 2) видно, что морфологии роста кристаллов при II→III и III→II превращениях похожие. Разница в том, что при превращении III→II

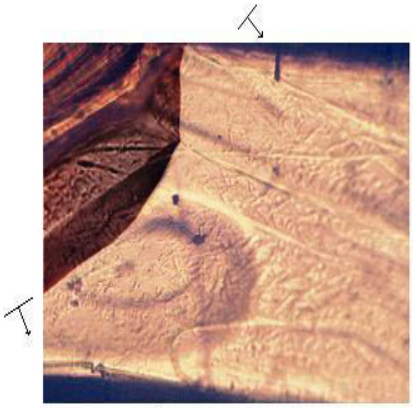
ширина границы между III и II фазами больше, чем ширина границы этих фаз при превращении II→III. Видимо, это связано с разностью плотностей II и III фаз.



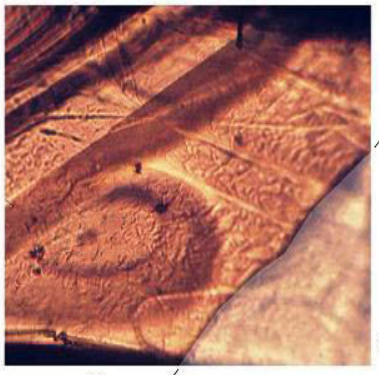
II←I



II←I

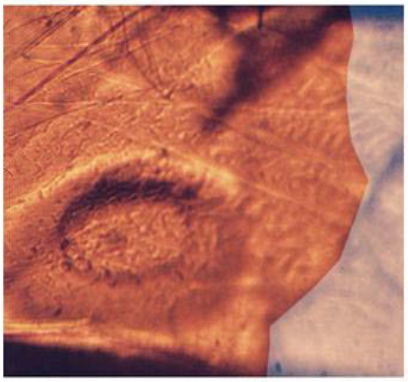


I



II

III↔II



III↔II

Рис.3.
Микрофотографии,иллюстрирующие рост кристалла I-модификации при превращении II→I. Ув.90^{x}.

Рис.4.
Микрофотографии, иллюстрирующие рост кристалла II-модификации при превращении II→II. Ув.90^{x}.

Рис.5.
Микрофотографии, иллюстрирующие рост кристалла III-модификации при превращении II→III. Ув.90^{x}.

ВЫВОДЫ

Эксперименты показывают, что рост кристаллов при IV↔III↔II↔I превращениях в $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ происходит с образованием и ростом зародышей кристаллов дочерних модификаций внутри матричных.

При частичном замещении Rb^{1+} в нитрате рубидия ионами Cs^{1+} температура задержки уменьшается, и превращение происходит почти без задержки, и это замещение отрицательно влияет на ограненный рост дочернего кристалла внутри матричного. Кроме того, в монокристаллах $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ полного цикла IV↔III↔II↔I превращений в одном и том же образце в большинстве случаев наблюдать невозможно, потому что в результате IV↔III↔II↔I превращений внутренние напряжения, накопленные в последних стадиях цикла превращений, приводят к разложению исследуемого образца. Даже при неограненном росте, в некоторых случаях, рост кристаллов при IV↔III↔II↔I превращениях происходит по типу монокристалл↔монокристалл и между IV и III модификациями не существует промежуточной x-модификации.

1. R.N. Brown, A.C. Mclaren, *Acta Cryst.,* **15** (1962) 977.
2. R.N. Brown, A.C. Mclaren, *Proc.Roy. Soc.,* **A266** (1962) 239.

3. U. Korhonen, *Ann. Acad. Sci. Fennical,* **A1 (**1951) 37.
4. L. Pauling, J. Sherman, *Z. Kristallogr. Kristallogeom,* **84** (1933) 213.
5. C. Finback, O. Hassel, *Z. Physik.,* **5** (1937) 460.
6. U. Korhonen, *Ann. Acad. Sci. Fennical,* **A1 (**1953) 150.
7. В.И. Насиров, Ч.М.Алекперов, Ф.Г. Магеррамова, *Изв.Пед.Универс.,* **1, 2** (1995) 70.
8. Ч.М. Алекперов, В.И. Насиров, Ф.Г. Магеррамова, Ю.Г. Асадов, *Препринт №4, ИФАН Азербайджана,* (1990) 38.
9. E.C. Schlemper, W.C. Hamilton, *J. Chem. Phys*., №45, **408(b)** (1966) 4498.
10. А.Ф. Хазиева, Ю.Г. Асадов, В.И. Насиров, *Докл. НАН Азерб.,* **LXV** №2 (2009) 66.
11. В.И. Насиров, А.Ф. Хазиева, Ю.Г. Асадов, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXIX** №5 (2009) 157.

$Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ MONOKRİSTALLARINDA POLİMORF ÇEVRİLMƏLƏR

A.F.HƏZIYEVA, V.İ.NƏSIROV, Y.Q.ƏSƏDOV, Y.İ.ALIYEV

Optik mikroskop vasitəsilə $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$-də polimorf IV↔III↔II↔I çevrilmələri zamanı IV, III, II və I modifikasiya kristallarının böyümə morfologiyası tədqiq olunmuş, IV və III, III və II, II və I modifikasiya kristalları arasında tarazlıq temperaturu təyin edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, tədqiq olunan kristallarda IV↔III↔II↔I çevrilmələr ana kristallar daxilində yeni kristal rüşeyminin əmələ gəlməsi və böyüməsilə baş verir. Çevrilmə monokristal-monokristal tiplidir.

THE POLIMORPHIK TRANSFORMATION IN $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ SINGLE CRYSTALS

A.F.HAZIYEVA, V.I.NASIROV, Y.G.ASADOV, Y.I.ALIYEV

Optical microscopy has been used to study morphology in the polymorphic IV↔III↔II↔I transition in $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ and the equilibrium temperatures for the IV and III, III and II, II and I phases. The data on the structure of the individuel modifications and growth morphology of the crystals of one modification allowed the general mechanism of the phenomena to be revealed.

Редактор: Дж.Исмайлов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГРАНИЦ РАЗДЕЛА МОНОКРИСТАЛЛОВ PbTe<Tl> СО СПЛАВОМ In-Ag-Au

Т.Д.АЛИЕВА, Н.М.АХУНДОВА, Г.Д.АБДИНОВА, Г.А.АХМЕДОВА, Д.Ш.АБДИНОВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г. Баку, пр.Г.Джавида, 33

Выяснено, что значения и характер температурной зависимости электрического сопротивления границ раздела PbTe-контактный сплав существенно и немонотонно зависят от концентрации Tl в PbTe. Такая зависимость объясняется созданием примесями таллия в PbTe глубоких акцепторных уровней и образованием комплексов типа примесный атом таллия - вакансия.

В последнее время интерес к термоэлектрикам и преобразователям на их основе значительно возрос. Это обусловлено появлением принципиально новых эффективных термоэлектрических материалов, использующих эффекты размерного квантования и возможностями создания объемных наноструктурированных образцов. С другой стороны, термоэлектрическое преобразование энергии способно ввести определенный вклад в решение экологических проблем.

Основные параметры полупроводниковых приборов, в том числе термоэлектрических преобразователей, существенно определяются и свойствами границ раздела термоэлектрика с контактными материалами (металлами). Контакт металл-полупроводник - многослойная структура, состоящая из тонких нанометровой толщины промежуточнных слоев переменного состава и измененного поверхностного слоя полупроводника. Электрические свойства контакта определяются сформированным переходным слоем, свойства которого зависят от свойств сплава и способа его нанесения.

Несмотря на то что PbTe и его твердые растворы являются эффективными материалами для современной полупроводниковой электроники, свойства их границ с металлами исследованы явно недостаточно.

В настоящем сообщении приводятся результаты исследования электрических свойств границ раздела монокристаллов PbTe с примесями таллия со сплавом мас.%95In+4Ag+1Au в интервале температур 77÷300К. Контакты созданы методом залуживания, электрические параметры контактов измеряли зондовым методом на переменном токе. Для объяснения полученных результатов исследована также температурная зависимость удельного сопротивления образцов зондовым методом на переменном токе.

Монокристаллы PbTe с примесями таллия были выращены методом Бриджмена из стехиометрического состава. Технологические параметры синтеза и выращивания монокристаллов PbTe приведены в [1]. Диаметр и длина выращенных слитков составляли ~14 и ~30мм, соответственно. Из этих слитков на установке электроэрозионной резки вырезались образцы для исследования в виде цилиндров длиной ~15мм. Для удаления нарушенного слоя, образующегося на поверхности при резке, поверхность образцов после резки обрабатывали электрохимическим травлением в растворе $KOH + C_6H_6O_6 + H_2O$. Полученные данные представлены на Рис.1 и Рис.2.

Из Рис.1 следует, что с ростом содержания таллия в PbTe до 0,01ат.% его удельное сопротивление при 77К уменьшается на несколько порядков. Дальнейший рост концентрации Tl до 0,05ат.% приводит к росту ρ примерно на два порядка, а затем с ростом концентрации таллия удельное сопротивление медленно падает. Аналогичная зависимость наблюдается и для контактного сопротивления r_k.

С ростом температуры ρ для нелегированного образца и r_k структуры на его основе уменьшаются, а для остальных образцов ρ и r_k с ростом температуры растут.

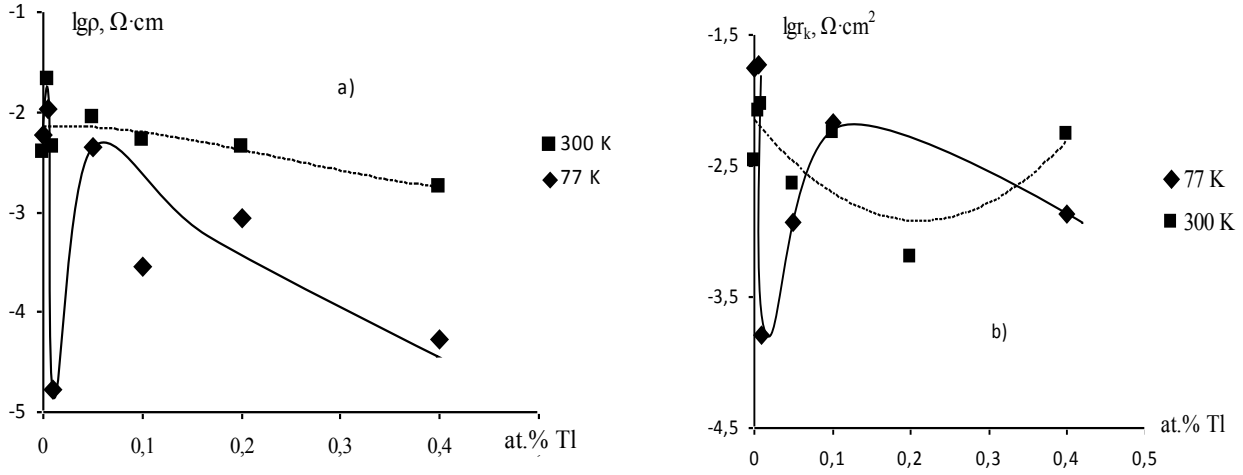


Рис.1.
Зависимости удельного сопротивления монокристаллов PbTe (a) и сопротивления границ раздела PbTe - контактный сплав (b) от концентрации таллия.

Полупроводниковый характер зависимости ρ от температуры для чистого неотожженного монокристаллического образца PbTe наблюдался и на постоянном токе [2]. Проведенный анализ показал, что такая зависимость ρ(T) обусловлена существованием в запрещенной зоне этих кристаллов акцепторных уровней с энергией активации ~ 0,08÷0,10эВ. Как видно из Рис.1, указанные акцепторные уровни обнаруживаются и в измерениях на переменном токе.

За счет ионизации акцепторных центров с ростом температуры растет концентрация основных носителей тока в PbTe, что приводит к уменьшению контактного сопротивления на границе раздела PbTe-контактный сплав [3].

Влияние таллия на r_k структуры PbTe – контактный сплав объясняется следующим образом. Примеси таллия в халькогениде свинца, в том числе в PbTe, являются глубокими акцепторами [4]. При этом выяснено, что до определенной концентрации таллия (для PbTe до $9x10^{19}$см$^{-3}$) холловская концентрация дырок (p) при 77К растет пропорционально N_{Tl}, причем каждый атом Tl создает одну дырку в валентной зоне. В области больших концентраций таллия в поликристаллических образцах PbTe функция $p(N_{Tl})$ при 77К демонстрирует тенденцию к насыщению, причем предельная концентрация дырок (~$1,2x10^{20}$÷$5x10^{19}$см$^{-3}$) в несколько раз ниже растворимости Tl в халькогениде свинца. Такая зависимость p от N_{Tl} объясняется самокомпенсацией акцепторного действия таллия собственными дефектами в этих соединениях. Теллурид свинца кристаллизуется со значительным отклонением от стехиометрии, что обуславливает наличие электрически активных собственных дефектов (в основном вакансий в подрешетке свинца и теллура с концентрацией, достигающих ~10^{18}÷10^{19}см$^{-3}$)[5].

В [6] показано, что в монокристаллических образцах с ростом концентрации вакансий растет и вероятность образования электронейтральных (два атома таллия с одной вакансией) или однократно заряженных (один атом таллия с одной вакансией) комплексов типа примесный атом-вакансия. Оба процесса будут сопровождаться уменьшением концентрации носителей тока в образце и уменьшением значения σ при данной температуре. По-видимому, таллий до

0,01ат.%, создавая акцепторные уровни в PbTe, приводит к росту концентрации носителей тока и уменьшению удельного сопротивления образца и r_k структуры PbTe-контактный сплав (Рис.1 а и б). При дальнейшем росте концентрации Tl создается вероятность образования электронейтральных или однократно заряженных комплексов типа примесный атом таллия-вакансия. Поэтому до концентрации ~0,1ат.% таллия ρ и r_k растет. Дальнейший рост концентрации Tl сопровождается возникновением в образце PbTe свободных (не образующих электронейтральные комплексы) атомов Tl, которые, создавая акцепторные уровни, приводят к росту концентрации носителей тока и уменьшению ρ и r_k.

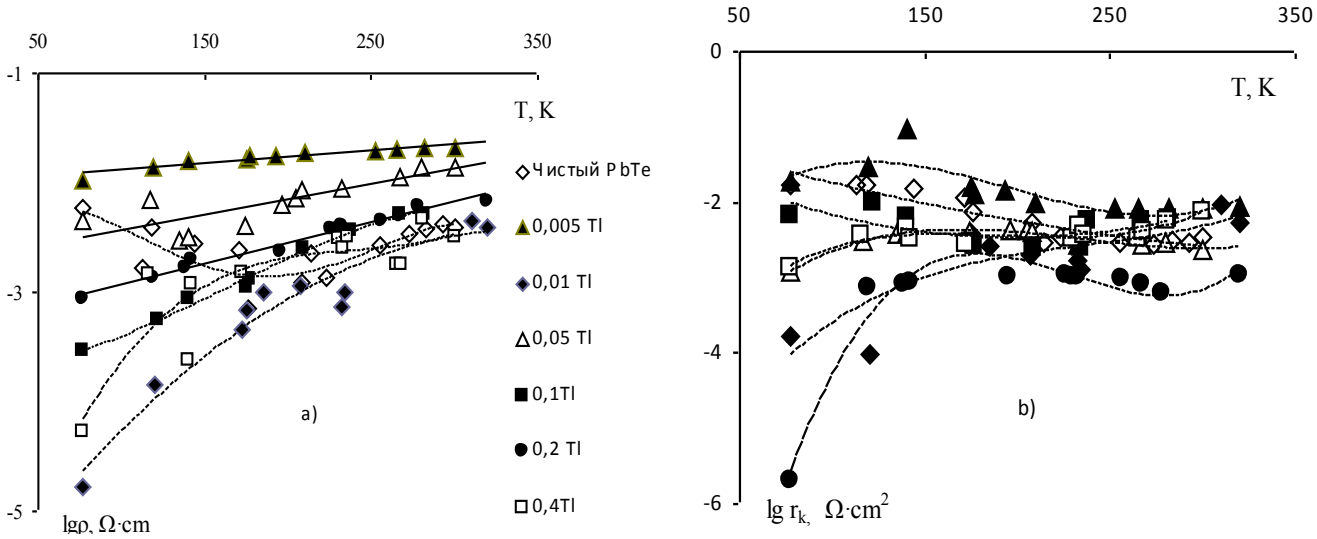


Рис.2.

Зависимости удельного сопротивления монокристаллов PbTe<Tl> (a) и сопротивления границ раздела PbTe<Tl> - контактный сплав (b) от температуры

Таким образом, выяснено, что значения и характер температурной зависимости электрического сопротивления границ раздела PbTe-контактный сплав существенно и немонотонно зависят от концентрации Tl в PbTe. Такая зависимость объясняется созданием примесями таллия в PbTe глубоких акцепторных уровней и образованием комплексов типа примесный атом таллия - вакансия.

1. З.Ф.Агаев, Э.М.Аллахвердиев, Г.М.Муртузов, Д.Ш.Абдинов, *Неорган. материалы*, **39** (2003) 543.
2. Г.А.Ахмедова, Г.З.Багиева, З.Ф.Агаев, Д.Щ.Абдинов, *ФТП*, **43** (2009) 1456.
3. Л.И.Лебедев, Физика полупроводниковых приборов, *М.:Физматгиз,* (2008) 488.
4. С.А.Немов, Ю.И.Равич, *УФН*, **168** (1998) 817.
5. Ю.И.Равич, Б.А.Ефимова, И.А.Смирнов, Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbTe, PbSe, PbS, *М.: Наука,* (1968) 383.
6. G.A.Ahmedova, Dj.Sh.Abdinov, *Fizika*, №2 (2010) 11.

PbTe<Tl> MONOKRISTALLARININ In-Ag-Au ƏRİNTİSİ İLƏ AYRILMA SƏRHƏDDININ ELEKTRIK XASSƏLƏRI

T.C.ƏLİYEVA, N.M.AXUNDOVA, G.C.ABDINOVA, G.Ə.ƏHMƏDOVA, C.Ş.ABDINOV

Göstərilmişdir ki, PbTe- kontakt ərintisi ayrılma sərhəddinin elektrik müqavimətinin qiyməti və temperatur asılılığı PbTe-da tallium aşqarlarının miqdarından güclü və qeyri-monoton asılıdır. Bu asılılıq

Tl aşqarlarının PbTe-da dərin akseptor səviyyələri yaratması və aşqar tallium atomu-vakansiya komplekslərinin yaranması ilə izah olunur.

ELECTRICAL PROPERTIES OF THE INTERFACE Of PbTe<Tl> SINGLE CRYSTAL WITH In-Ag-Au ALLOY

T.D.ALIYEVA, N.M.AKHUNDOVA, G.D.ABDINOVA, G.A.AKHMEDOVA, D.Sh.ABDINOV

It has been found that the values and temperature dependence of electrical resistance of the interfaces PbTe-contact alloy significantly and non-monotonically dependent on the concentration of Tl into PbTe. This dependence has been explained by the creation of thallium impurity in PbTe deep acceptor levels and the formation of complexes of the type of thallium impurity atom – vacancy.

Редактор: С.Мехтиева

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ PbTe С ИЗБЫТКОМ СВИНЦА

Г.З.БАГИЕВА, Н.Б.МУСТАФАЕВ, Г.Д.АБДИНОВА, Д.Ш.АБДИНОВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г. Джавида, 33

Показано, что термообработкой можно управлять значением и характером температурных зависимостей кинетических коэффициентов, а также типом проводимости монокристаллов PbTe с избытком Pb, что обусловлено более равномерным распределением избыточных атомов свинца по образцу и залечиванием структурных дефектов при отжиге.

Теллурид свинца кристаллизуется со значительным отклонением от стехиометрии, что обуславливает наличие большого количества электрически активных собственных дефектов, например, вакансий в подрешетках свинца или теллура [1]. Вакансия свинца (избыточный атом халькогена) дает две дырки. В [2] показано, что введением в монокристаллы PbTe избыточных атомов Pb можно получить кристаллы со свойствами близкими к стехиометрическим образцам, что обусловлено уменьшением концентрации вакансий в подрешетке свинца.

Равномерное распределение атомов избыточного свинца по кристаллу можно добиваться с помощью длительной термообработки. Исходя из этого, в данной статье исследовано влияние отжига при различных температурах на электрические свойства образцов монокристаллов PbTe с избытком свинца.

Монокристаллы PbTe с 0,005; 0,05; 0,1 и 0,5ат.% избытком Pb были выращены методом Бриджмена [3]. Образцы с геометрическими размерами 3×5×12мм были изготовлены по [2]. Электрические параметры измеряли на постоянном токе зондовым методом в направлении роста кристаллов в интервале температур 77÷300К.

Отжиг образцов проводился в среде спектрально чистого аргона при температурах 200, 300 и 400°С в течение 5 суток.

Результаты измерений представлены на Рис.1-Рис.3. Видно, что значения при данной температуре и характер температурных зависимостей электропроводности (σ), коэффициентов термоэдс (α) и Холла (R) отожженных образцов существенно отличаются от таковых для неотожженных образцов, приведенных в [2]. Так, согласно [2], в случае неотожженных образцов, электропроводность образца, не содержащего дополнительного свинца, в интервале ~ 130÷260К имеет полупроводниковый характер с энергией активации ~0,08÷0,10эВ. При концентрации избыточного свинца 0,005ат.% электропроводность кристалла при 77К растет в 1000 раз, а σ(T) обладает металлическим характером. Дальнейший рост избыточного Pb приводит к монотонному уменьшению σ при 77К. Однако при содержании 0,05 и 0,5ат.% Pb электропроводность с ростом температуры растет в интервале ~120÷230К.

Зависимости коэффициентов термоэдс и Холла неотожженных образцов при ~77К от содержания избыточного Pb хорошо коррелируются с подобными зависимостями электропроводности. Коэффициент α для всех образцов положителен и с ростом температуры растет. Знак коэффициента Холла для стехиометрического образца и образцов с 0,005÷0,1ат.% избыточного свинца положительный, а для образца с 0,5ат.% свинца - отрицательный. Для стехиометрического образца и образца с 0,5ат.%Pb с ростом температуры абсолютное значение R уменьшается, что хорошо согласуется с температурной зависимостью σ для этих образцов.

С ростом температуры отжига постепенно полупроводниковый характер σ(T) при низких температурах снимается (рис. 1а), образцы, отожженные при 300°С, обладают металлическим характером σ (T) (рис. 2а), а на σ (T) образцов, содержащих 0,005 и 0,05ат.% избытка Pb, отожженных при 400°С в интервале температур 190÷275К, наблюдается полупроводниковый характер проводимости. Коэффициенты α и R с ростом температуры отжига постепенно меняют знак с положительного на отрицательный при низких температурах. В случае образцов, прошедших отжиг при 400°С, коэффициенты α и R с ростом температуры меняют знак с отрицательного на положительный.

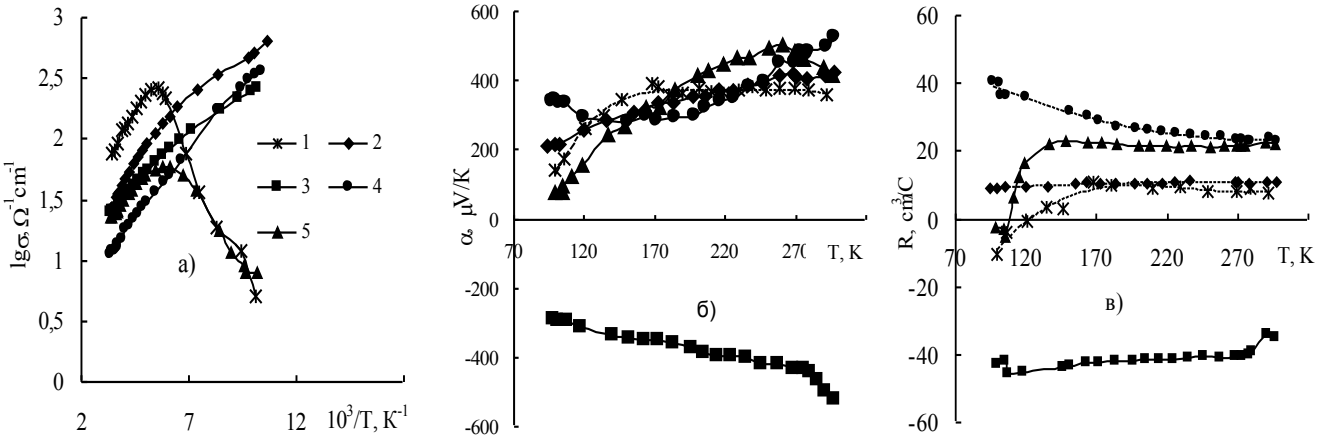


Рис.1.

Зависимости электропроводности (а), коэффициента термоэдс (б) и Холла (в) монокристаллов PbTe, прошедших отжиг при 200°С от температуры. Кривые 1-5 относятся к образцам, не содержащим и содержащим 0,005; 0,05; 0,1; 0,5ат.% избыточного свинца, соответственно.

Соединения PbTe кристаллизуются с избытком теллура, и вследствие этого стехиометрические образцы (т.е. образцы, полученные из стехиометрической шихты) не прошедшие отжиг обладают p-типом проводимости. Валентная зона соединения состоит из двух подзон (зоны легких и тяжелых дырок). С ростом температуры зона легких дырок опускается вниз и вклад тяжелых дырок в проводимость растет. Поэтому с ростом температуры α этих образцов растет.

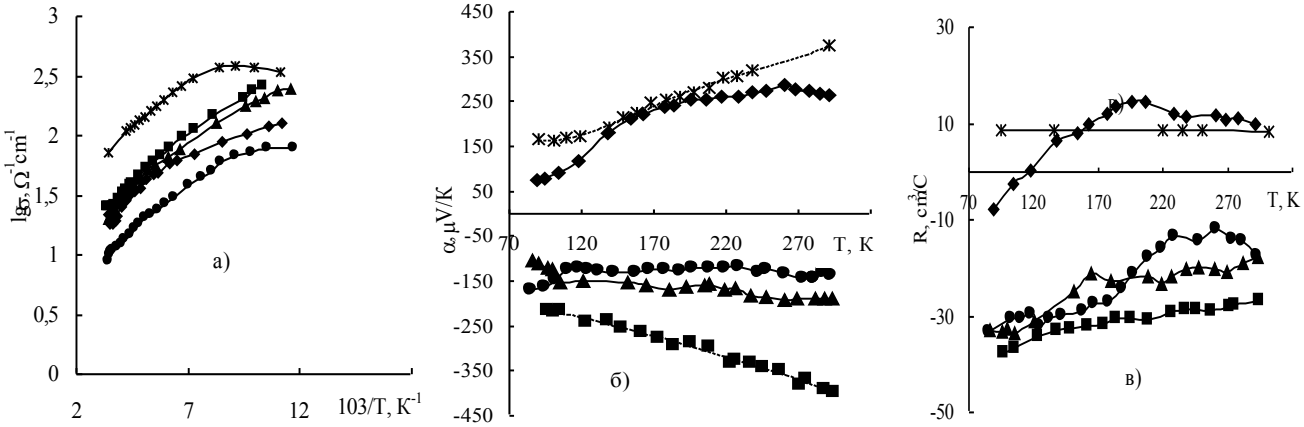


Рис.2

Зависимости электропроводности (а), коэффициента термоэдс (б) и Холла (в) монокристаллов PbTe, прошедших отжиг при 300°С от температуры. Обозначения те же, что и на Рис. 1.

В запрещенной зоне монокристаллов PbTe кроме мелких акцепторных и донорных уровней существуют и глубокие акцепторные уровни с энергией

активации ~0,1эВ [4,5]. Эти уровни проявляются в образцах с удельной электропроводностью ~5Ом$^{-1}$см$^{-1}$.

Принимается, что малые концентрации избыточного Pb (до ~0,005ат.%), распределяясь по кристаллу, создают примесные центры и приводят к росту концентрацию дырок, т.е. к увеличению σ и уменьшению α и R в неотожженных образцах. Дальнейший рост концентрации избыточного свинца сопровождается уменьшением вакансий в подрешетке свинца и, следовательно, концентрации дырок в образце. Поэтому в неотожженных образцах постепенно превалирует электронная проводимость, коэффициент α уменьшается и имеет тенденцию к инверсии знака с положительного к отрицательному, а коэффициент Холла при 0,5ат.% избыточного свинца обладает отрицательным знаком при температуре ~230К. С ростом концентрации избыточного Pb кристаллы приближаются к истинно стехиометрическому образцу и в них начинают выявляться акцепторные уровни с энергией активации ~0,1эВ. В связи с тем что подвижность электронов в ~2 раза больше, чем подвижность дырок в стехиометрическом неотожженном образце, коэффициент Холла отрицательный.

С термообработкой в образцах происходит равномерное распределение избыточных атомов свинца, что приводит к уменьшению концентрации вакансий в подрешетке Pb по всему объему образца. Параллельно с этим происходят и гомогенизация и залечивание структурных (например, деформационных) дефектов образца. Возможно и образование новых вакансий в подрешетке теллура, играющих роль мелких доноров.

Эти процессы сопровождаются ростом подвижности носителей тока (дырок и электронов). Однако рост подвижности электронов превалирует над ростом подвижности дырок. Поэтому в отожженных при 300°С образцах с 0,05; 0,1 и 0,5ат.% избыточного Pb, а также отожженных при 400°С образцах с избытком свинца и без его избытка при низких температурах знаки α и R отрицательные.

С ростом температуры происходит ионизация глубоких акцепторных уровней в образцах, обнаруженных в [2], что приводит к инверсии знаков α и R с отрицательного на положительный. Об этом свидетельствуют и данные по σ(T). При температурах выше ~200К на кривых σ(T) некоторых образцов наблюдается экспоненциальный рост σ (например, кривые 2 и 3, Рис.3а) с энергией активации ~0,08÷0,1эВ, что хорошо согласуется с данными [4].

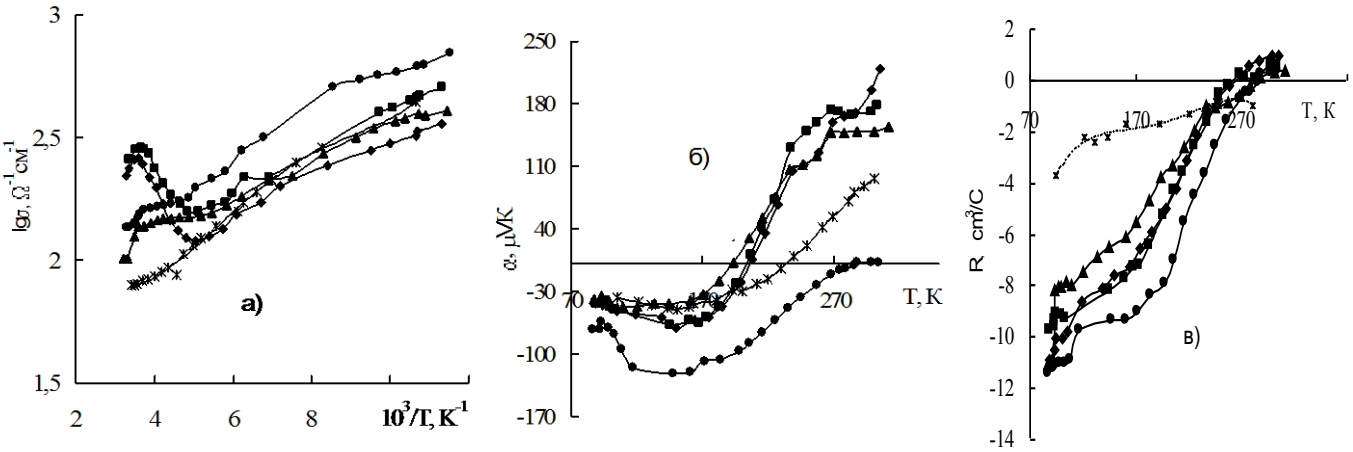


Рис.3.

Зависимости электропроводности (а), коэффициента термоэдс (б) и Холла (в) монокристаллов PbTe, прошедших отжиг при 400°С от температуры. Обозначения те же, что и на Рис. 1.

Таким образом, термообработкой можно управлять значением и характером температурных зависимостей кинетических коэффициентов, а также типом проводимости монокристаллов PbTe с избытком Pb, что обусловлено более равномерным распределением избыточных атомов свинца по образцу и залечиванием структурных дефектов при отжиге.

1. С.А.Немов, Ю.И. Равич, *УФН,* **168** (1998) 817.
2. Г.З.Багиева, Н.Б.Мустафаев, С.Д.Джафарова, Г.Д.Абдинова, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXX** №2 (2010) 106.
3. З.Ф.Агаев, Э.А.Аллахвердиев, Г.М.Муртузов, Д.Ш.Абдинов, *Неорган. материалы*, **39** (2003) 543.
4. Н.Б.Мустафаев, Г.З.Багиева, Г.А.Ахмедова, З.Ф.Агаев, Д.Ш.Абдинов, *ФТП,* **43** (2009) 149.
5. Г.А.Ахмедова, Г.З.Багиева, З.Ф.Агаев, Д.Ш.Абдинов, *ФТП,* **43** (2009) 1456.

QURĞUŞUN ARTIQLIĞINA MALİK PbTe MONOKRİSTALLARININ ELEKTRİK XASSƏLƏRİNƏ TABLAMANIN TƏSİRİ

G.Z.BAĞIYEVA, N.B.MUSTAFAYEV, G.C.ABDİNOVA, C.Ş.ABDİNOV

Göstərilmişdir ki, müxtəlif rejimlərdə tablama aparmaqla qurğuşun artıqlığına malik PbTe monokristallarının kinetik parametrlərinin qiymətini və temperatur asılılığının xarakterini idarə etmək olar. Bu, termik emal nəticəsində nümunələrdə artıq Pb atomlarının daha bərabər paylanması ilə əlaqədardır.

INFLUENCE OF THE ANNEALING ON ELECTRIC PROPERTIES OF PbTe SINGLE CRYSTALS WITH EXCESS LEAD

G.Z.BAGIYEVA, N.B. MUSTAFAYEV, G.D.ABDINOVA, D.Sh.ABDINOV

It has been shown that by the heat treatment could be controlled value and character of temperature dependences of kinetic factors, as well as type of conductivity of PbTe single crystals with excess lead that is conditioned by more uniform distribution of excess lead atoms on the sample and curing of structural defects at annealing.

Редактор: С.Мехтиева

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ГЛУБОКИЙ АКЦЕПТОРНЫЙ КОМПЛЕКС, СВЯЗАННЫЙ С ПРИМЕСЬЮ МЕДИ, В ТЕРМООБРАТОТАННЫХ КРИСТАЛЛАХ $Ge_{1-x}Si_x$ <Cu,Ga>

Л.А.ГУСЕЙНЛИ, З.М.ЗЕЙНАЛОВ*, З.М.ЗАХРАБЕКОВА, Г.Х.АЖДАРОВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ-1143, Баку, пр. Г.Джавида, 33
*Гянджинский Государственный Университет**
AZ 2700, Гянджа, пр. Шах Исмаила Хатаи, 187

На основе холловских измерений установлено, что термическая обработка кристаллов $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Ga> ($0 \le x \le 0,20$) при 1050÷1080К приводит к образованию в них дополнительных глубоких акцепторных центров (ГАЦ). Энергия связи ГАЦ растѐт линейно с содержанием кремния в кристалле и описывается соотношением E_k^x=(66+370x)мэВ. Отжиг кристаллов при 550÷570К приводит к исчезновению этих центров. Показано, что наиболее вероятной моделью для дополнительных ГАЦ является комплекс из пары, состоящей из замещающих атомов меди и галлия ($Cu_s\,Ga_s$) или из межузельных атомов меди и замещающих атомов галлия ($Cu_i\,Ga_s$).

Медь в кремнии, германии и их твѐрдых растворах создаѐт три глубоких акцепторных уровня и существенно влияет на электрические свойства этих классических полупроводников в широкой области температур [1]. Три акцепторных уровня, наблюдаемые в этих материалах, относят к замещающим атомам этой примеси [1]. В германии энергия этих уровней составляет E_v+40мэВ, E_v+330мэВ и E_c –260мэВ. Медь является быстродиффундирующей примесью в Ge, Si и Ge-Si, и поэтому распад еѐ пересыщенного раствора в этих кристаллах при термической обработке успешно используется для прецизионного управления концентрацией примеси в матрице. Однако тенденция быстродиффундирующих глубоких примесей к образованию соединений и комплексов с различными дефектами кристаллической решѐтки при термической обработке материала [2-8], может привести к созданию дополнительных электроактивных образований, существенно влияющих на электрические свойства матрицы. Несомненно, определение условий создания таких центров и их параметров является важным вопросом в деле получения материала с заданными свойствами.

В работе [8] показано, что закалка кристаллов $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Al> ($0 \le x \le 0.2$) с 1050÷1080К приводит к образованию в них дополнительных ГАЦ. Наиболее вероятной моделью для дополнительных электроактивных центров авторы считают комплекс из пары, состоящей из атомов меди и алюминия. В настоящей работе на основе холловских измерений изучено влияние термической обработки в интервале 1050÷1150К на спектр примесных состояний в кристаллах $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Ga> ($0 \le x \le 0.2$), сложнолегированных медью и одним из типичных (как и алюминий) мелких акцепторных примесей – галлием, наиболее часто используемым при легировании Ge, Si и Ge-Si. Цель работы – определение возможности и условий образования дополнительных электроактивных центров при термической обработке кристаллов.

Кристаллы Ge и Ge-Si с содержанием Si до 20ат.%, легированные одновременно галлием и сурьмой, выращивались модернизированным методом Бриджмена. Заметим, что сурьма использовалась в качестве вспомогательной мелкой донорной примеси для управления степенью компенсации акцепторных состояний исследуемых примесей [9]. Это необходимо для выявления в холловских измерениях дополнительных уровней, возникающих в запрещѐнной зоне кристалла. Оптимальные технологические операционные параметры для получения заданного уровня и соотношения концентраций примесей в выращенных кристаллах определяли математическим моделированием распределения примесей в слитке на основе соотношений, полученных в [10,11]. В зависимости от

соотношения концентраций примесей галлия и сурьмы образцы обладали электронной или дырочной проводимостью. Образцы, в форме прямоугольного параллелепипеда толщиной ~1.5 мм, после соответствующей обработки и очистки поверхности [12] легировали медью диффузионным методом при температуре максимальной растворимости этой примеси в кристалле заданного состава [4]. После определения температурной зависимости коэффициента Холла в интервале 65÷350К образцы подвергались термической обработке при 1050÷1150К. При каждой температуре образцы выдерживали 4 часа. За это время устанавливалось равновесное состояние [2]. Закалку проводили сбрасыванием образцов в этиловый спирт, охлаждѐнный до температуры сублимации сухого льда. Энергетические положения примесных состояний и их концентрации в термически обработанных кристаллах определяли на основе температурных зависимостей концентрации свободных носителей заряда в кристаллах по данным холловских измерений. Заметим, что преимуществом этого метода является возможность достаточно точного определения концентрации и энергии активации примесных уровней [5].

Образцы Ge и Ge-Si с концентрацией примесей галлия (N_{Ga}) и сурьмы (N_{Sb}) порядка 10^{15}÷10^{16}см$^{-3}$ обладают электронной (при N_{Sb}> N_{Ga}) или дырочной (при N_{Sb}< N_{Ga}) проводимостью. После легирования образцов медью при 1150÷1175К температурный ход концентраций свободных носителей заряда в них проявляет различные акцепторные состояния Cu_s [4] в зависимости от величин N_{Ga} и N_{Sb}. Последующая термическая обработка этих кристаллов в интервале 1050÷1150К показала, что в образцах Ge<Cu,Ga,Sb> и $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Ga,Sb>, закалѐнных с 1050÷1080К, создаются дополнительные акцепторные уровни, расположенные выше первого уровня меди. Проявляются эти уровни в кристаллах, в которых мелкий акцепторный уровень галлия сильно или полностью компенсирован. Заметим, что в кристаллах Ge<Cu,Sb> и $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Sb> без примеси галлия после их закалки с температур выше 1050К образование дополнительных электроактивных центров не обнаруживается [4].

На Рис.1 и Рис.2 для примера представлены температурные зависимости концентрации дырок (p) для образцов - Ge<Cu,Ga,Sb> и $Ge_{0.85}Si_{0.15}$<Cu,Ga,Sb>, в которых проявляются дополнительные ГАЦ. Образцы, данные которых представлены на Рис.1, до легирования медью обладали дырочной проводимостью, обусловленной примесью галлия с эффективной концентрацией ($N^*_{Ga} = N_{Ga} - N_{Sb}$) порядка 10^{15}см$^{-3}$. Заметим, что абсолютные значения концентрации примесей галлия и сурьмы в образцах порядка 10^{16}см$^{-3}$. После легирования образцов медью экспериментальные данные p от T достаточно хорошо описываются теорией [9] с учѐтом активации первого акцепторного уровня меди в матрице, шунтированного мелкой акцепторной примесью с концентрацией N^*_{Ga} (кривые 1 и 1*). Экспериментальные данные образцов Ge и $Ge_{0.85}Si_{0.15}$ после термической обработки при 1050 и 1070К, соответственно (кривые 2 и 2*), в отличие от кривых 1 и 1*, показывают экспоненциальный спад p от T в области низких температур. Известно, что такой ход p от T характерен при активации частично компенсированного уровня в полупроводнике [9] и свидетельствует об отсутствии мелких уровней шунтирующих первый уровень меди. Экспериментальные данные по образцам, обладающим до легирования медью электронной проводимостью, связанной с примесью сурьмы с эффективной концентрацией порядка 10^{15}см$^{-3}$, приведены на Рис.2. Здесь, как и для первой пары образцов, зависимости p от T после легирования медью достаточно хорошо описываются теорией в рамках активации нижнего уровня меди, частично компенсированного электронами примеси сурьмы с концентрацией равной N^*_{Sb}. Следует обратить внимание на рост наклона кривых

после термической обработки обоих кристаллов. Такой характер изменения *p* от T, свидетельствует о появлении дополнительных акцепторных уровней, расположенных выше первого уровня Cu_s.

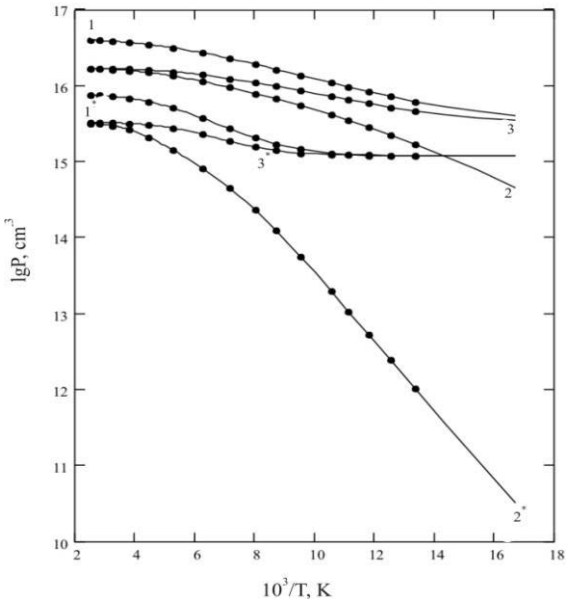


Рис.1.

Температурные зависимости концентрации свободных дырок для образцов - Ge<Cu, Ga, Sb> (1-3) и $Ge_{0.85}Si_{0.15}$ <Cu, Ga, Sb> (1^*-3^*), обладающих до легирования медью дырочной проводимостью: 1, 1^* - после легирования образцов медью при 1150 и 1175К; 2, 2^* - после термообработки при 1050 и 1070К; 3, 3^* - после отжига при 550К в течение 20 часов. Сплошные линии теоретические расчѐты, наилучшим образом согласующиеся с экспериментальными данными (1, 1^* и 3, 3^* рассчитаны с учѐтом действия первого уровня меди, шунтированного акцепторными уровнями галлия: Cu_s – E_{Cu1}= E_v+40мэВ в Ge и E_{Cu1}=E_v+80.5мэВ в $Ge_{0.85}Si_{0.15}$ [9]; 2, 2^* – активными являются два уровня - первый акцепторный уровень Cu_s и дополнительный акцепторный центр с уровнем $E_к$= E_v+66мэВ в Ge и $E_к$= E_v+122мэВ в $Ge_{0.85}Si_{0.15}$.

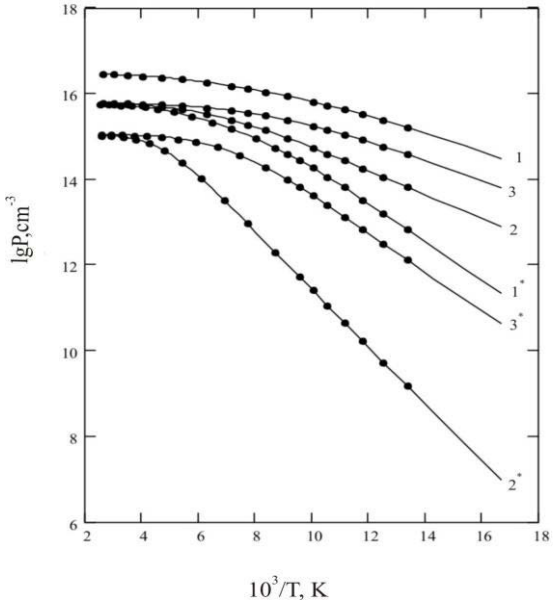


Рис.2.

Температурные зависимости концентрации свободных дырок для образцов - Ge<Cu, Ga, Sb> (1-3) и $Ge_{0.85}Si_{0.15}$ <Cu, Ga, Sb> (1^*-3^*), обладающих до легирования медью электронной проводимостью: 1, 1^*- после легирования образцов медью при 1150 и 1175К; 2, 2^* - после термообработки при 1050 и 1070К; 3, 3^*- после отжига при 550К в течение 20 часов. Сплошные линии теоретические расчѐты, наилучшим образом согласующиеся с экспериментальными данными (1, 1^* и 3, 3^* рассчитаны с учѐтом действия частично компенсированного электронами примеси сурьмы первого уровня меди: Cu_s – E_{Cu1}= E_v+40мэВ в Ge и E_{Cu1}=E_v+80.5мэВ в $Ge_{0.85}Si_{0.15}$ [9]; 2, 2^* – активными являются два уровня - первый акцепторный уровень Cu_s и дополнительный акцепторный центр с уровнем $E_к$= E_v+66мэВ в Ge и $E_к$= E_v+122мэВ в $Ge_{0.85}Si_{0.15}$.

Для установления природы дополнительных ГАЦ были проведены эксперименты по отжигу образцов. Как и в отмеченных выше работах [2,5,8], отжиг проводили при температурах 550÷570К. Результаты проведѐнных исследований показали, что во всех образцах $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Ga,Sb> ($0\leq x\leq 0.2$) при этих температурах происходит распад дополнительных акцепторов, и отжиг в течении 20 часов приводит к их полному исчезновению. Кривые 3 и 3^* на Рис.1 и Рис.2 демонстрируют зависимости *p* от T в рассматриваемых образцах после такого отжига. При этом, как видно из этих рисунков, ход кривых 3 и 3^* для всех образцов во всѐм интервале температур достаточно хорошо описывается теорией с учѐтом действия частично компенсированного первого акцепторного уровня Cu_s, с концентрацией равной растворимости меди при температуре, соответствующей термообработки образца. Здесь, как и в случае кривых 1 и 1^*, эффективные концентрации шунтирующих (Рис.1) и компенсирующих (Рис.2) атомов мелких

примесей совпадают соответственно с исходными N^*_{Ga} и N^*_{Sb} до легирования образцов медью.

Результаты анализа экспериментальных данных, полученных в этом направлении для образцов с различным составом и исходным содержанием примесей, показывают, что наиболее вероятными кандидатами для объяснения природы дополнительных ГАЦ в кристаллах следует считать пары Cu_s Ga_s или Cu_i Ga_s. Известно, что равновесная концентрация межузельных атомов меди Cu_i в кремнии и германии при различных температурах такого же порядка, как и узельных Cu_s [13]. Процесс образования указанных пар в кристаллах Ge и Ge-Si, подвергнутых термообработке в интервале 1050÷1080K, можно представить в следующем виде. Избыточная, по сравнению с равновесной, концентрация меди при температуре отжига переходит из узлов в междоузлия $Cu_s \rightarrow Cu_i + V$ (V-вакансия). Часть атомов меди, находившаяся в стоках в электрически пассивном состоянии, также переходит в междоузлия (стоки Cu) $\rightarrow Cu_i$. При температурах 1050÷1080K акцепторные атомы галлия, находящиеся в узлах решѐтки, отрицательно заряжены, а межузельные атомы меди положительно [14]. Достаточно мобильные положительно заряженные атомы меди, мигрируя в матрице, взаимодействуют с отрицательно заряженными атомами Ga_s и образуют пары $Cu_i + Ga_s \rightarrow Cu_i Ga_s$ или $Cu_i + (Ga_s + V) = Cu_s Ga_s$, которые проявляют себя как ГАЦ. Вакансии и оставшиеся межузельные атомы меди в процессе закалки переходят в стоки Cu_i, V→стоки. В пользу образования пар Cu_sGa_s свидетельствует их достаточная устойчивость вплоть до температур 1080K, хотя имеются и данные об устойчивости пар образованных между межузельными и узловыми атомами примесей в рассматриваемых материалах [2,5,8].

Для определения энергии активации (E_k) и концентрации дополнительных ГАЦ (N_k) интерпретацию данных кривых 2 и 2* на Рис.1 и Рис.2 проводили в рамках двухуровневой системы по уравнению [9]

$$p + N^{**}_{Sb} = \frac{N_{Cu}}{1 + \dfrac{p\gamma_{Cu1}}{N_v \exp(-E_{Cu1}/kT)}} + \frac{N_K}{1 + \dfrac{p\gamma_k}{N_v \exp(-E_K/kT)}}, \qquad (1)$$

здесь N_{Cu} – концентрация атомов Cu_s и дополнительных акцепторных центров, E_{Cu1} – энергия активации первого уровня меди, γ_{Cu1} γ_k - факторы вырождения первого уровня меди и ГАЦ, N_{Sb}^{**} - эффективная концентрация компенсирующих атомов сурьмы при наличии дополнительных ГАЦ, N_v – эффективная масса плотности состояний в валентной зоне кристалла.

Искомые параметры E_k и N_k вычисляли путѐм подгонки теоретических кривых к экспериментальным с использованием метода наименьших квадратов. В уравнении (1) факторы вырождения обоих акцепторных уровней γ_{Cu1}, γ_k принимались равными четырѐм [5]. Значения N_v и E_{Cu1} заимствовали из литературных данных [12]. Концентрацию замещающих атомов меди определяли по данным кривых 3 в области высоких T. Сплошные линии 2 и 2* на рисунках отвечают теоретическим кривым, рассчитанным с использованием следующих значений параметров примесей и дополнительных глубоких акцепторных центров:
Рис.1: $E_к = E_v + 66$мэВ, $E_{Cu1} = E_v + 40$мэВ, $N_k = 4.9 \cdot 10^{15}$см$^{-3}$, $N_{Cu} = 1.4 \cdot 10^{16}$см$^{-3}$, $N_{Sb}^{**} = 1.7 \cdot 10^{15}$см$^{-3}$ для кривой 2; $E_к = E_v + 122$мэВ, $E_{Cu1} = E_v + 80{,}5$мэВ, $N_k = 2{,}25 \cdot 10^{15}$см$^{-3}$, $N_{Cu} = 2{,}1 \cdot 10^{15}$см$^{-3}$, $N_{Sb}^{**} = 1{,}05 \cdot 10^{15}$см$^{-3}$ для кривой 2*.

Рис.2: $E_к=E_v+66$мэВ, $E_{Cu1}=E_v+40$мэВ, $N_k=5{,}1\cdot10^{15}$см$^{-3}$, $N_{Cu}=1.35\cdot10^{16}$см$^{-3}$, $N_{Sb}^{**}=1.26\cdot10^{16}$см$^{-3}$ для кривой 2; $E_к= E_v+122$мэВ, $E_{Cu1}= E_v+80{,}5$мэВ, $N_k=2{,}3\cdot10^{15}$см$^{-3}$, $N_{Cu}=1{,}95\cdot10^{15}$см$^{-3}$, $N_{Sb}^{**}=3{,}15\cdot10^{15}$см$^{-3}$ для кривой 2*.

Глубокие акцепторные комплексы, создаются во всех исследованных нами составах кристаллов $Ge_{1-x}Si_x$ ($0\le x\le 0{,}20$). Результаты исследований энергии активации этих центров в кристаллах показывают линейный рост $E_к$ с содержанием кремния в матрице, который удовлетворительно описывается соотношением

$$E_k^x=(E_k^0+370x)\text{мэВ}=(66+320x)\text{мэВ}. \quad (2)$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Закалка кристаллов $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Ga,Sb> ($0\le x\le 0{,}20$) с 1050÷1080К приводит к образованию в них дополнительных ГАЦ. Энергия активации этих центров растѐт линейно с содержанием кремния в матрице. Отжиг образцов при 550÷570К приводит к исчезновению дополнительных акцепторных уровней. Наиболее вероятной моделью для ГАЦ является комплекс из пары Cu_sGa_s или Cu_iGa_s. При использовании метода диффузионного легирования кристаллов $Ge_{1-x}Si_x$<Ga> медью необходимо учитывать генерацию дополнительных глубоких акцепторных уровней.

1. А.Милнс, *Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках. М.: Мир,* (1977) 562.
2. П.Г.Аждаров, *Неорган. Материалы,* **36** (2000) 526.
3. И.Н.Белокурова, В.Д. Дегтярев, Е.Д.Скуднова*, Неорган. Материалы*, **22** (1986) 145.
4. Г.Х.Аждаров, Р.З.Кязимзаде, В.В.Мир-Багиров, *ФТП,* **26** (1992) 553.
5. Y.Kamiura, F.Hoshimoto, T.Nobusada, S.Yoneyama, *J. Appl. Phys*, **56** (1984) 936.
6. Е.В.Скуднова, В.Ф.Дегтярев, В.К.Прокофьева*, Неорган. Материалы*, **24** (1988) 198.
7. А.А.Гвелесиани, В.Ф.Дегтярев, Е.В.Скуднова*, Неорган. Материалы*, **23** (1987) 368.
8. Г.Х.Аждаров., З.М.Зейналов, З.М.Захрабекова, А.И.Кязимова, *Кристаллография.* **55** (2010) 499.
9. Д.Блекмор, *Статистика электронов в полупроводниках. М*., (1964) 392
10. З.М.Захрабекова, З.М.Зейналов, В.К.Кязимова, Г.Х.Аждаров*, Неорган. Материалы,* **43** (2007) 5.
11. Г.Х. Аждаров, З. М. Зейналов, Л. А. Гусейнли, *Кристаллография,* **54** (2009). 137.
12. G. Azhdarov, R. Kyazimzade, M. Hostut *Sol. State Commun*., **111** (1999) 675.
13. R.N.Hall, J.H.Racette, *J. Appl. Phys.,* **33** (1964) 379.
14. Y.Kamiura, F.Hashimoto, *Jpn. J. Appl. Phys.,* **28** (1989) 753.

TERMOEMAL EDILMIŞ $Ge_{1-X}Si_X$<Cu,Ga> KRISTALLARINDA MISLƏ ƏLAQƏLI DƏRIN AKSEPTOR KOMPLEKSLƏR

L.A.HÜSEYINLI, Z.M.ZEYNALOV, Z.M.ZÖHRABBƏYOVA, H-G.X.ƏJDƏROV

Xoll ölçüləri əsasında göstərilib ki 1050-1080 K intervalında mürəkkəb aşqarlanmış $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Ga> ($0\le x\le 0{,}20$) kristallarının termoemalı onlarda əlavə dərin akseptor mərkəzlərinin (DAM) yaranmasına gətirir. Bu mərkəzlərin aktivasiya enerjisi kristalda silisiumun konsentrasiyası ilə xətti olaraq artır və $E_k^x=(66+370x)$meV tənliyi ilə ifadə olunur. Göstərilib ki yeni DAM-ın ən ehtimal olunan modeli mis və qallium aşqarlarının cütlükləridir.

COPPER RELATED DEEP ACCEPTOR COMPLEX IN THERMALLY TREATED $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Ga> CRYSTALS

L.A.GUSEYNLI, Z.M.ZEYNALOV, Z.M.ZAKHRABEKOVA, G.Kh.AZHDAROV

It has been shown by Hall measurements that heat treatment of $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Ga>($0 \le x \le 0,20$) crystals at 1050÷1080K leads to the formation of additional deep acceptor centers (DAC) in them. The activation energy of DAC increases linearly with an increase in the silicon content in the crystal and is described by the relation E_k^x=(66+370x)meV. Annealing these crystals at 550÷570K removes the additional acceptor centers. It has been shown that the most likely model for the additional DAC is a pair consisting of substituent copper and aluminum atoms (Cu_sGa_s) or interstitial copper and substituent aluminum atoms (Cu_iGa_s).

Редактор: М.Алиев

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ТВЁРДЫХ РАСТВОРОВ $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$, ЛЕГИРОВАННЫХ ЦИНКОМ И ИНДИЕМ

Х.В.АЛИГУЛИЕВА, Н.А.АБДУЛЛАЕВ, С.Ш.КАХРАМАНОВ, Т.Г.КЕРИМОВА, Г.С.МЕХДИЕВ, К.М.МУСТАФАЕВА

Институт физики НАН Азербайджана
AZ-1143, г. Баку, пр. Г.Джавида, 33

Исследованы электропроводность, эффект Холла и магнитосопротивление в монокристаллах твѐрдых растворов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$,, легированных цинком и индием, в диапазоне магнитных полей H~0÷80кЭ и температур T=5÷300K. Выявлено, что легирование атомами цинка и индия оказывает компенсирующее воздействие, несколько уменьшая начальную концентрацию электронов. Показано, что в легированных индием и цинком твѐрдых растворах $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ анизотропия проводимости повышается, главным образом за счѐт увеличения удельного сопротивления в направлении перпендикулярном слоям. Это позволяет предположить, что при легировании часть атомов внедряется в ван-дер-ваальсовые щели между слоями в виде дефектов. Определены степени температурных зависимостей подвижности в плоскости слоѐв и перпендикулярно слоям. Ослабление температурных зависимостей в легированных твѐрдых растворах свидетельствует о повышении роли в механизмах рассеяния процессов рассеяния носителей на дефектах. Установлено, что холл-факторы исследованных соединений близки по величине (f_{II}~0,25÷0,3), что свидетельствует о том, что легирование не оказывает сколь-нибудь заметного влияния на зонные параметры электронов в твѐрдом растворе$(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$.

ВВЕДЕНИЕ

Твѐрдые растворы на основе соединений группы $A_2^V B_3^{VI}$ нашли широкое практическое применение в качестве одного из компонентов высокоэффективных термоэлектрических преобразователей [1]. В последнее время интерес к этим кристаллам усилился в связи с перспективами расширения диапазона рабочих температур таких материалов и повышения их термоэлектрической эффективности [2-6]. Увеличение подвижности носителей заряда является одним из путей повышения термоэлектрической эффективности. В настоящей работе представлены результаты исследований электропроводности и гальваномагнитных эффектов (эффект Холла и магнитосопротивление) в слоистых монокристаллах твѐрдых растворов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$, легированных индием и цинком.

Монокристаллы твѐрдых растворов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$, как и монокристаллы группы $A_2^V B_3^{VI}$, обладают ромбоэдрической структурой и относятся к кристаллам с пространственной группой D_{3d}^5 ($R\bar{3}m$) [1]. Они принадлежат большой группе соединений, кристаллизующихся в слоистую структуру, слои в которых перпендикулярны оси симметрии третьего порядка.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Монокристаллы твѐрдых растворов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$, легированные индием и цинком, выращивались методом Бриджмена и вертикально направленной кристаллизацией из компонент со стехиометрическим соотношением. Зононаправленная кристаллизация проводилась при скорости перемещения зоны 3см/час. Рентгеноструктурные исследования образцов проводились на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3М.

Исследования проводились в интервале температур 5÷300K, и магнитных полях вплоть до 8Тл. При гальваномагнитных исследованиях образец помещался в центр сверхпроводящего соленоида. Образцы для исследований получались из монокристаллических слитков простым скалыванием вдоль поверхности, содержащей плоскость слоя. Образцы приготовлялись в форме прямоугольных

пластин, толщинами 0,2÷0,8мм. Измерения проводились стандартным четырѐхзондовым методом по селективной методике на переменном токе частотой 20Гц, величина тока не превышала 1мА. Ток при гальваномагнитных исследованиях направлялся в плоскости слоя, а магнитное поле, как правило, было направлено перпендикулярно плоскости слоя. Температуры ниже 1К получались с помощью криооткачки изотопа гелия He^3.

Величины сопротивлений при исследованиях электропроводности определялись по схеме постоянного по величине тока (обычно 1мА) посредством комбинированного прибора Lock-in Amplifier SR-830. Погрешность измерений была меньше 1%.

Абсолютные значения удельного сопротивления в плоскости слоѐв (ρ_{par}) и перпендикулярно слоям (ρ_{per}) определялись усовершенствованным четырѐхзондовым комбинационным методом Шнабеля [7], разработанным специально для изучения анизотропии электропроводности слоистых кристаллов. Контакты при таких измерениях наносились попарно на противоположные стороны пластинки в прямоугольной геометрии.

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ

Известно [8], что монокристаллы $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ в связи с доминированием дефектов, обусловленных расположением атомов Bi в междоузлиях и ведущих себя как доноры, имеют всегда *n*-тип проводимости. В нелегированных соединениях $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ концентрация электронов составляет около $n \sim 6 \cdot 10^{19} cm^{-3}$. Как показали исследования эффекта Холла, легирование атомами индия и цинка оказывает компенсирующее действие и концентрация электронов в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ несколько уменьшается до $n \sim 5,7 \cdot 10^{19} cm^{-3}$ в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> и $n \sim 5,2 \cdot 10^{19} cm^{-3}$ в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ <Zn>.

На Рис.1 приведены рассчитанные температурные зависимости абсолютных значений удельных сопротивлений в плоскости слоѐв ρ_{par} (вставка a) и перпендикулярно слоям ρ_{per} (вставка b) в монокристаллах $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (кривая 1), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> (кривая 2) и $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (кривая 3). Характерный для этих соединений “металлический” ход температурной зависимости удельного сопротивления обусловлен большой концентрацией примесных состояний, образующих в запрещѐнной зоне широкую примесную зону, по которой осуществляется проводимость.

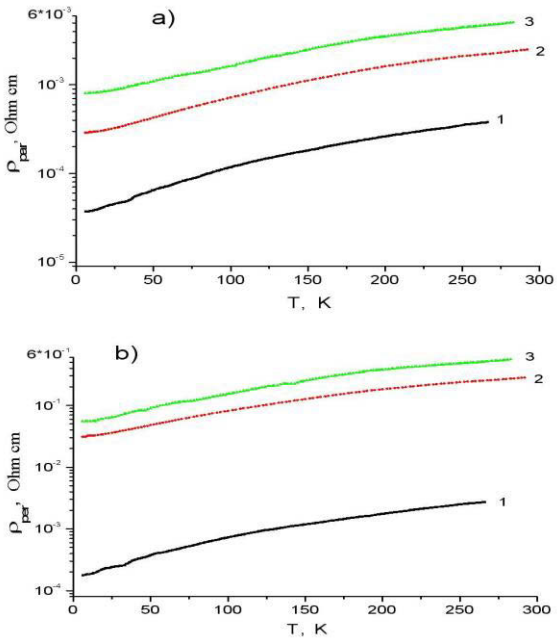


Рис.1.
Температурные зависимости удельных сопротивлений в плоскости слоѐв ρ_{par} (вставка a) и перпендикулярно слоям ρ_{par} (вставка b) в монокристаллах твѐрдых растворов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (кривая 1), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> (кривая 2) и $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (кривая 3) в области температур 5K<T<300K.

Хорошо заметно, что наиболее сильная температурная зависимость удельного сопротивления ($\rho(300K)/\rho(5K)$ как в плоскости слоѐв, так и в направлении перпендикулярном слоям, наблюдается в нелегированных образцах $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$. Это свидетельствует о том, что легирование приводит к

возрастанию роли примесного рассеяния в процессах рассеяния электронов. Об этом также свидетельствует и сопоставление величин остаточного сопротивления при температуре ~5К: в легированных образцах $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ величины остаточного сопротивления и в плоскости слоѐв (вставка a) и в направлении перпендикулярном слоям (вставка b) на порядок больше, чем в нелегированных образцах. Причѐм в направлении перпендикулярном слоям и в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> (кривая 2 вставки b) и в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (кривая 3 вставки b) эти значения остаточного сопротивления больше на два порядка. Вследствие этого анизотропия электропроводности ρ_{per}/ρ_{par} в легированных образцах $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ индием и цинком значительно больше, чем в нелегированном $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (Рис.2). Как видно из рисунка, при T~300K $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> ρ_{per}/ρ_{par}~112 и $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> ρ_{per}/ρ_{par}~110, в то время как в нелегированном $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ ρ_{per}/ρ_{par}~7. Это позволяет предположить, что при легировании часть атомов внедряется в промежутки между слоями из-за плотной упаковки атомов внутри слоѐв-квинтетов. Такие дефекты, практически не влияя на перенос заряда в плоскости слоѐв, сильно ограничивают проводимость в направлении перпендикулярном слоям, что и приводит к наблюдаемой большой анизотропии электропроводности.

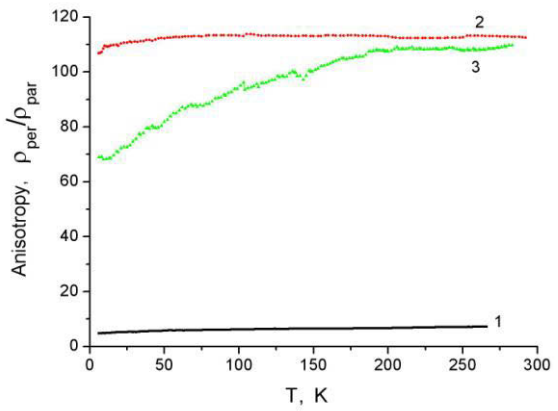


Рис.2.
Температурные зависимости анизотропии удельных сопротивлений ρ_{per}/ρ_{par} в области температур 5K<T<300K в монокристаллах твѐрдых растворов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (кривая 1), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> (кривая 2) и $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (кривая 3).

На Рис.3 приведены температурные зависимости подвижности носителей заряда исследованных образцов. Как видно из рисунка, в области температур 100K<T<300K в нелегированных монокристаллах $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (кривые 1) подвижность электронов в плоскости слоѐв (a) с температурой меняется как $\mu_{II}(T)\sim T^{-1,3}$, а в перпендикулярном направлении (b) - $\mu_{\perp}(T)\sim T^{-1,5}$.

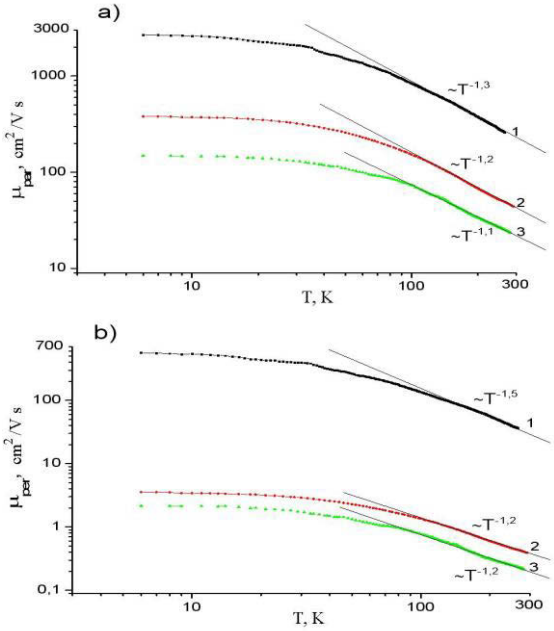


Рис.3.
Температурные зависимости подвижностей электронов в плоскости слоѐв μ_{par} (вставка a)) и перпендикулярно слоям μ_{per} (вставка b) в монокристаллах твѐрдых растворов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (кривая 1), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ <In> (кривая 2) и $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (кривая 3) в области температур 5K<T<300K.

Такое изменение подвижности с температурой обусловлено доминированием процессов рассеяния электронов на фононах. В $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ легированном индием (кривые 2) и в плоскости слоѐв $\mu_{II}(T)\sim T^{-1,2}$, и в перпендикулярном направлении - $\mu_{\perp}(T)\sim T^{-1,2}$, а в Bi_2Te_3 легированном цинком (кривые 3) в плоскости слоѐв $\mu_{II}(T)\sim T^{-1,1}$, а в перпендикулярном направлении - $\mu_{\perp}(T)\sim T^{-1,2}$. Ослабление температурной зависи-мости подвижности в легированных твѐрдых растворах, очевидно, обусловлено увеличением роли процессов рассеяния электронов на примесях.

МАГНИТОСОПРОТИВЛЕНИЕ

На Рис.4 приводится панорама зависимости поперечного сопротивления от магнитного поля при T=0,5К в интервале полей 0÷8Тл в нелегированных образцах $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (кривая 1), в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> (кривая 2) и в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (кривая 3). Из Рис.4 следует, что у всех образцов наблюдается высокое магнитосопротивление: при величине магнитного поля B=4Тл сопротивление возрастает более чем 2 раза ($\Delta\rho/\rho>1$), а в области слабых магнитных полей (B<1Тл) наблюдается классическая “лоренцевская” квадратичная по полю зависимость иагнитосопротивления.

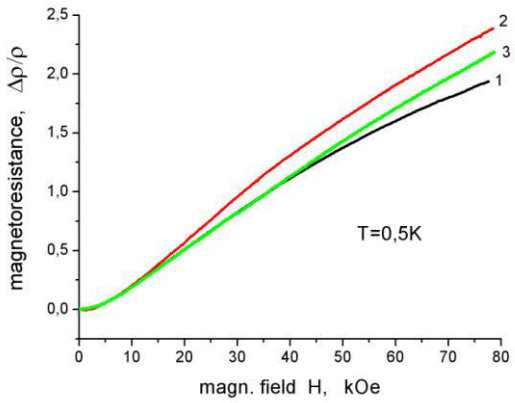


Рис.4.
Полевые (H≈0÷80кЭ) зависимости магнитосопротивления $\Delta\rho/\rho$ $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (кривая 1), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> (кривая 2) и $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (кривая 3) при температуре T=0,5К.

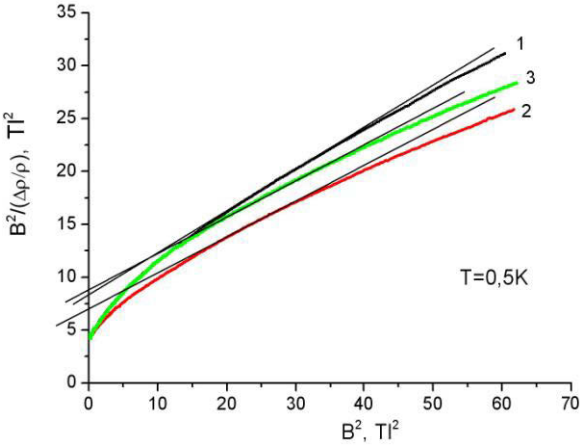


Рис.5.
Полевые зависимости магнитосопротивления, построенные в координатах $\left(\frac{B^2}{(\Delta\rho/\rho_0)};(B^2)\right)$, монокристаллов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (кривая 1), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> (кривая 2) и $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (кривая 3) при температуре T=0,5К.

В работе [5] в рамках общепринятой шестиэллипсоидной модели зонной структуры Bi_2Te_3 Дреббла-Вольфа [9] получены формулы, удовлеворительно описывающие зависимость поперечного удельного сопротивления ρ_{xx} от магнитного поля *B*. Учитывая, что магнитное поле направлено перпендикулярно слоям, т.е. вдоль оси C_3, и при сильном вырождении газа носителей заряда согласно [5]

$$\frac{\rho_{xx}(B)}{\rho_0}=\frac{1+(R_0\sigma_0 B)^2/f_{II}}{1+(R_0\sigma_0 B)^2}, \qquad (1)$$

здесь ρ_0 и σ_0 - значения удельного сопротивления и проводимости при B=0, а

$R_0 = \rho_{123}$ при B→0, а f_{II}- холл-фактор, обусловленный анизотропией эффективных масс и ориентацией эллипсоидов относительно кристаллографических осей. Для удобства (1) можно переписать как

$$\frac{B^2}{(\Delta\rho/\rho_0)} = \frac{1}{\left(\frac{1}{f_{II}}-1\right)(R_0\sigma_0)^2} + \frac{1}{\left(\frac{1}{f_{II}}-1\right)}B^2 \cdot \qquad (2)$$

Из зависимости (2), построенной в координатах $\frac{B^2}{(\Delta\rho/\rho_0)} - (B^2)$, можно определить по тангенсу угла наклона прямой сначала f_{II}, а затем из отрезка, отсекаемого прямой на оси ординат и холловскую подвижность $\mu_H = R_0\sigma_0$.

Зависимости $\frac{B^2}{(\Delta\rho/\rho_0)} - (B^2)$ для нелегированных образцов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (кривая 1), в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> (кривая 2) и в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (кривая 3) представлены на Рис.5. Определѐнные из рисунка 5 тангенсы угла наклона прямых и отрезки, отсекаемые на оси ординат, примерно равны в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (0,42 и 7,8Тл^2), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> (0,33 и 7,1Тл^2), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> (0,34 и 8,9Тл^2). Соответственно значения холл-фактора f_{II} и холловской подвижности μ_H примерно равны в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ (f_{II}=0,3 и μ_H≈2300см^2/В·сек), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<In> ($f_{II}$=0,25 и μ_H≈2200см^2/В·сек), $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$<Zn> ($f_{II}$=0,26 и μ_H≈2000см^2/В·сек). Как видно из приведенных результатов, величины холл-факторов очень близки по значению и лежат в интервале 0,25÷0,3, что близко к значению холл-фактора в самом Bi_2Te_3 (f_{II}=0,37) [10]. Это указывает на отсутствие заметного влияния примесей на зонные параметры электронов в $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$. Высокая подвижность электронов в исследованных соединениях, слабо меняющаяся при переходе от одного состава к другому (μ_H≥2000см^2/В·сек), свидетельствует, во-первых, о том, что полученные кристаллы были достаточно высокого качества, а, во-вторых, рассеяние электронов на примесях не является доминирующим. Высокое значение подвижности электронов в легированных твѐрдых растворах $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$ делает эти соединения перспективными для использования в качестве одного из компонент высокоэффективных термоэлектрических преобразователей.

Авторы благодарят коллектив Лаборатории электронной кинетики Института физики твѐрдого тела РАН за предоставление возможности проведения низкотемпературных исследований.

1. Б.М.Гольцман, В.А.Кудинов, И.А.Смирнов, *Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе Bi_2Te_3,* Наука., М., (1972).
2. Г.Т.Алексеева, П.П.Константинов, В.А.Кутасов, Л.Н.Лукъянова, Ю.И.Равич, *ФТТ,* 38 (1996) 2998.
3. М.К.Житинская, С.А.Немов, Л.Д.Иванова, *ФТТ,* **44** (2002) 41.
4. В.А.Кутасов, Л.Н.Лукъянова, П.П.Константинов, *ФТП,* **34** (2000) 389.
5. Р.Лайхо, С.А.Немов, А.В.Лашкул, Э.Лахдеранта, Т.Е.Свечникова, Д.С.Дворник, *ФТП,* **41** (2007) 565.
6. Н.П.Степанов, С.А.Немов, М.К.Житинская, Т.Е.Свечникова, *ФТП,* **41** (2007) 808.
7. P.Schnabel, Zeits. Angew. Phys., **22** (1967) 136; Ф.Н.Абдуллаев, Т.Г.Керимова, Н.А.Абдуллаев, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXV** №5 (2005 83.

8. К.М.Мустафаева, С.Ш.Кахраманов, Т.Г.Керимова, Н.А.Абдуллаев, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXIX** №2 (2009) 86.
9. J.R.Drabble, R.Wolfe, Proc. Phys. Soc., **69** (1956) 1101.
10. Н.А.Абдуллаев, С.Ш.Кахраманов, Т.Г.Керимова, К.М.Мустафаева, С.А.Немов, *ФТП,* **43** (2009) 156.

SINKLƏ VƏ INDIUMLA AŞQARLANMIŞ $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ BƏRK MƏHLULLARINDA ELEKTRIK VƏ QALVANOMAQNIT XASSƏLƏRI

X.B.ƏLIQULIYEVA, N.A.ABDULLAYEV, S.Ş. QƏHRƏMANOV, T.H.KƏRIMOVA, Q.S.MEHDIYEV, K.M.MUSTAFAYEVA

Sinklə və indiumla aşqarlanmış $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ bərk məhlullarında H~0÷80kE maqnit sahəsi diapazonunda və T=5÷300K temperaturunda elektrikkeçiricilik, Holl effekti və maqnitmüqaviməti təqdid edilmişdir. Aşkar edilmişdir ki, sink və indium atomları ilə aşqarlanma ilkin elektron konsentrasiyasını azaldaraq kompensasiyaedici təsir göstərir. Göstərilmişdir ki, indium və sinklə aşqarlanan $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ bərk məhlullarında kristallarda keçiriciliyin anizotropiyası xüsusi müqavimətin laylara perpendikulyar istiqamətdə artması hesabına böyük qiymət alır. Bu onu ehtimal etməyə imkan verir ki, aşqar element atomlarının bir hissəsi defektlər qismində van-der-vaals çuxurlarına düşürlər. Laylar boyunca və laylara perpendikulyar istiqamətdə yüyrüklüyün temperatur asılılığının dərəcəsi təyin edilmişdir. Aşqarlanmış bərk məhlullarda temperatur asılılığının zəifləməsi səpilmə mexanizmlərində yükdaşıyıcıların defektlərdən səpilməsinin rolunun artmasından xəbər verir. Müəyyən edilmişdir ki, tədqiq edilən birləşmələrdə holl-faktoru (f_{II}~0.25-0.3) qiymətinə yaxındır ki, bu da aşqarlanmanın $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ bərk məhlullarında elektronların zona parametrlərinə güclü təsir etməməsindən xəbər verir.

ELEKTRIC AND GALVANOMAGNETIC PROPERTIES OF $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ SOLID SOLUTIONS DOPED BY ZINCUM AND INDIUM

X.B.ALIQULIYEVA, N.A.ABDULLAYEV, S.Sh.QAHRAMANOV, T.G.KERIMOVA, G.S.MEHDIYEV, K.M.MUSTAFAYEVA

The electroconductivity, Hall effect and magnetoresistance in $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ solid solutions doped by zincum and indium in magnetic field diapason H~0÷80 kOe and temperature range T=5÷300K have been investigated. Doping by zincum and has been shown that in $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ solid solutions doped by zincum and indium, anizotropy of conductivity increases, mainly by the reason of increase of resistivity perpendicular to the layers. It allows atoms of the impurities by doping implant mainly Van-der-waals gaps between layers as a defect to be suggested. Degree of temperature dependence in doped solid solutions in layer and perpendicular to the layers have been determined. The weakening of temperature dependence of mobility in doped crystals indicates the rise of the role of scaffering processes of carries on defects.

It has been shown that Hall-factors of investigated compounds have been closed on the value (f_{II}~0.25-0.3), that testifies that the doping has not rendered noticeable effect on zone parameters of electrons in $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ solid solutions.

Редактор: Дж.Абдинов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА И КОНФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА АНАЛОГОВ ПЕПТИДА CREKA

Г.Д.АББАСОВА, И.Н.АЛИЕВА, А.И.ОМАРОВА*, Н.М.ГОДЖАЕВ**

Бакинский Государственный Университет
AZ 1148, г.Баку, ул.З.Халилова, 23
*Азербайджанский Медицинский Университет**
AZ 1022, г.Баку, ул.Бакиханова, 23
*Университет Гафгаз***
AZ 0101, г.Баку,Сумгаитское шоссе, 16км

Методом молекулярной механики в приближении атом-атомных потенциальных функций изучено влияние замен аминокислотных остатков в первичной структуре пептида CREKA на структуру и конформационные свойства его аналогов.

ВВЕДЕНИЕ

Сегодня успехи в теоретическом исследовании строения и свойств пептидных молекул связаны с наличием и доступностью многочисленных вычислительных программ, основанных на различных приближениях методов молекулярной механики, на эмпирических и полуэмпирических приближениях методов квантовой химии и др. [1-3]. Результаты, полученные с помощью этих методов, в ряде случаев, не уступают данным экспериментальных исследований. В то же время, они в большинстве случаев являются необходимым дополнением для интерпретации данных эксперимента. К таким методам исследования относится и метод теоретического конформационного анализа, основанный на физической модели атома и использующий полуэмпирические потенциальные функции для описания структуры, конформационных свойств и реакционной способности пептидов и белков [4,5]. В данной работе методом теоретического конформационного анализа исследованы конформационные свойства аналогов пептидной молекулы, обладающей ярко выраженным противоопухолевым эффектом против рака простаты. Пептид, состоящий из пяти аминокислотных остатков Cys1-Arg2-Glu3-Lys4-Ala5 (далее, пептид CREKA), был впервые синтезирован в 2006 году и впоследствии стал объектом пристального внимания различных исследователей благодаря своей уникальной способности накапливаться в высоких концентрациях вблизи опухолевых клеток в различных органах и тканях [6-8]. Ранее нами были исследованы структура и конформационная подвижность молекулы CREKA, изучены динамические особенности основной и боковых цепей аминокислотных остатков, входящих в структуру пептида [9-11]. В литературе описаны многочисленные химические модификации пептида CREKA, осуществленные с целью получения более эффективных аналогов молекулы. В большинстве случаев предпринимались попытки замены остатков в различных положениях пептидных цепей на природные L-аминокислотные остатки и исследовалось влияние таких замен на биологическую активность молекулы. Так, в работе [7] были изучены свойства аналога пептида CREKA, в котором Arg2 был заменен на Pro2 (аналог CPEKA) с целью предотвратить воздействие протеаз. Исследования показали, что такой аналог сохраняет свойства природного пептида, в то же время обладает большей устойчивостью по отношению к протеолитическим ферментам. Однако все выполненные химические модификации CREKA в значительной степени носили случайный характер, так как проводились методом проб и ошибок. Поэтому результаты измерений активности противоречивы, трудно поддаются анализу, а сопоставление экспериментальных данных приводит лишь к ориентировочным оценкам корреляции между структурой и функцией CREKA.

В данной работе с целью изучения влияния замен аминокислотных остатков на пространственную структуру и конформационные свойства молекулы CREKA, были исследованы 17 модифицированных аналогов природного пептида. Сопоставление стабильных конформаций и анализ результатов исследований по конформационной подвижности позволили выявить общие элементы пространственной организации аналогов CREKA. Полученные результаты могут служить основой для установления взаимосвязи между структурой и функцией CREKA, а, следовательно, и базой для синтеза высокоэффективных аналогов противоопухолевых соединений с пролонгированным эффектом действия.

МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Исследование пространственного строения и конформационной подвижности аналогов пептида CREKA проводилось методом теоретического конформационного анализа по методике, подробно изложенной в работах [4,5]. При конформационном расчете использовали полуэмпирические потенциальные функции, описывающие невалентные электростатические взаимодействия атомов, торсионную энергию и энергию образования водородных связей [5]. Потенциальные функции были аппроксимированы к условиям водной среды, величина диэлектрической проницаемости принята равной 10, а водородные связи предполагались ослабленными (максимальная энергия при r_0=1.8Å составляла 1.5ккал/моль) [12]. Величины барьеров вращения вокруг одинарных связей взяты из работы [13]. В качестве начальных приближений при минимизации стартовых структур пептидов использованы значения двугранных углов, соответствующие низкоэнергетическим состояниям монопептидов [4,5]. Минимизацию энергии проводили методом сопряженных градиентов при фиксированных значениях длин связей и валентных углов [14]. К числу варьируемых параметров относятся двугранные углы основной (φ, ψ, ω) и боковых цепей (χ_1, χ_2, χ_3,…), составляющих молекулу аминокислотных остатков. Отсчет двугранных углов проводили согласно общепринятой номенклатуре [15]. Набор полученных структур анализировали на основе данных относительной конформационной энергии $E_{отн}$ расстояний между C^{α}-атомами основной цепи и параметров внутримолекулярных водородных связей.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В Таблице 1 приведена последовательность аминокислотных остатков природного пептида CREKA и его 17 модифицированных аналогов. Исследования проводились на основе поэтапного расчета низкоэнергетических конформационных состояний отдельных фрагментов с использованием программы и техники расчетов, описанных в работах [16-18].

В линейной последовательности пептида CREKA последовательно было проведено ряд замен: остаток Cys1 заменялся на аланин или серин; аргинин во втором положении-на пролин или лизин; Glu3 на аспарагиновую кислоту; Lys4 на положительно заряженную аминокислоту аргинин; а Ala5 был заменен в ряде аналогов на неполярную аминокислоту валин (Таблица1).

В Таблице 2 приведены низкоэнергетические конформационные состояния пептида CREKA и его аналогов, рассчитанные методом теоретического конформационного анализа. Таблица 2 включает минимизированные значения полной конформационной энергии ($E_{полн}$), вклады от отдельных видов взаимодействий: невалентных ($E_{нев}$), электростатических ($E_{эл}$) и торсионных ($E_{торс}$), а также относительную конформационную энергию рассчитанных структур ($E_{отн}$).

Здесь же приведены расстояния между C^{α}-атомами аминокислотных остатков, входящих в структуру пептида CREKA и его 17 аналогов.

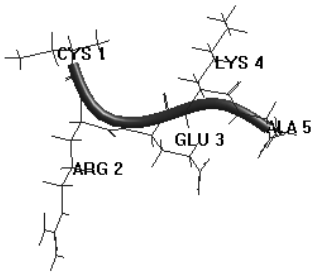
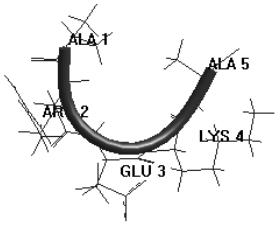
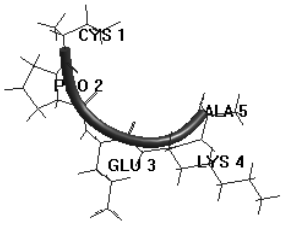
Таблица 1.

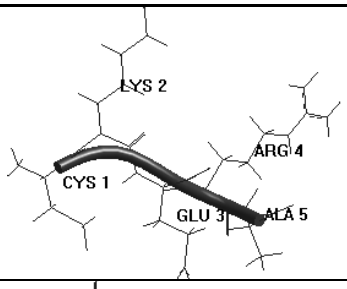
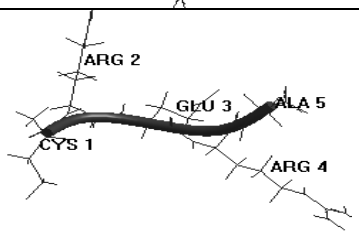
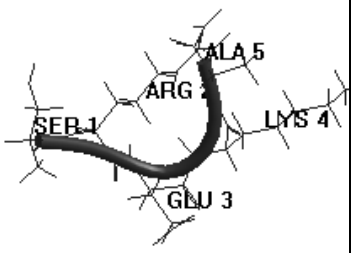
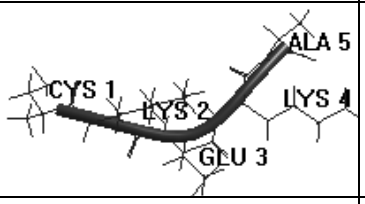
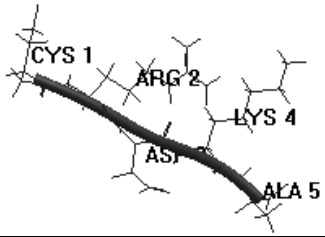
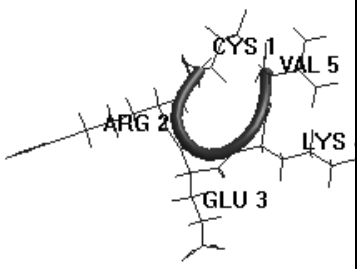
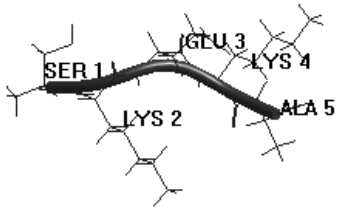
Пептид CREKA и его аналоги.

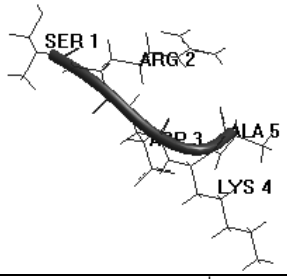
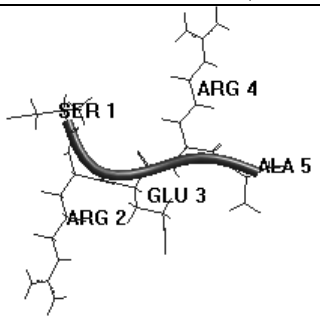
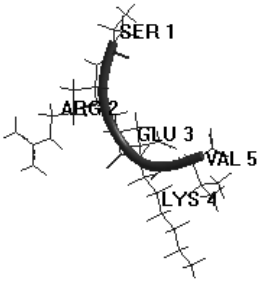
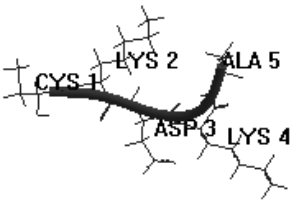
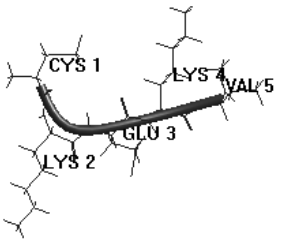
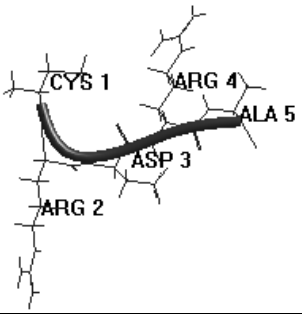
Пептид CREKA и его аналоги	Аминокислотная последовательность
CREKA	Cys1-Arg2-Glu3-Lys4-Ala5
AREKA	Ala1- Arg2-Glu3-Lys4 -Ala5
CPEKA	Cys1-Pro2-Glu3-Lys4-Ala5
CKERA	Cys1-Lys2-Glu3-Arg4-Ala5
CRERA	Cys1-Arg2-Glu3-Arg4-Ala5
SREKA	Ser1-Arg2-Glu3-Lys4-Ala5
CKEKA	Cys1-Lys2-Glu3-Lys4-Ala5
CRDKA	Cys1-Arg2-Asp3-Lys4-Ala5
CREKV	Cys1-Arg2-Glu3-Lys4-Val5
SKEKA	Ser1-Lys2-Glu3-Lys4-Ala5
SRDKA	Ser1-Arg2-Asp3-Lys4-Ala5
SRERA	Ser1-Arg2-Glu3-Arg4-Ala5
SREKV	Ser1-Arg2-Glu3-Lys4-Val5
CKDKA	Cys1-Lys2-Asp3-Lys4-Ala5
CKEKV	Cys1-Lys2-Glu3-Lys4-Val5
CRDRA	Cys1-Arg2-Asp3-Arg4-Ala5
CRDKV	Cys1-Arg2-Asp3-Lys4-Val5
CRERV	Cys1-Arg2-Glu3-Arg4-Val5

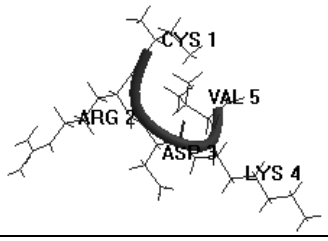
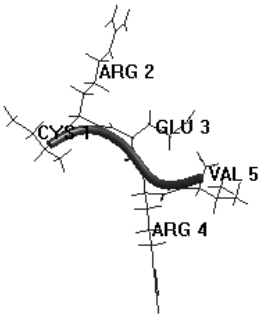
Таблица 2.

Низкоэнергетические конформационные состояния и энергетические вклады (ккал/моль) пептида CREKA и его аналогов.

Пептид	Пространственная структура	$E_{нев}$	$E_{эл}$	$E_{торс}$	$E_{полн}$	$E_{отн}$	Расстояние между C^{α}-атомами, Å	
CREKA [9-11]		-16.0	2.8	1.9	-11.3	3.2	Cys1-Glu3 Cys1-Lys4 Cys1-Ala5 Arg2-Lys4 Arg2-Ala5 Glu3-Ala5	6.1 7.4 11.1 6.6 9.7 6.1
1. AREKA		-16.2	1.8	6.2	-11.8	2.7	Ala1-Glu3 Ala1-Lys4 Ala1-Ala5 Arg2-Lys4 Arg2-Ala5 Glu3-Ala5	6.1 7.9 11.4 7.1 9.9 6.1
2. CPEKA		-14.5	1.5	3.5	-9.5	5.0	Cys1-Glu3 Cys1-Lys4 Cys1-Ala5 Pro2-Lys4 Pro2-Ala5 Glu3-Ala5	4.5 6.6 10.1 3.4 5.9 6.4

3. CKERA		-17.5	6.1	4.4	-7.1	7.4	Cys1-Glu3 Cys1-Arg4 Cys1-Ala5 Lys2-Arg4 Lys2-Ala5 Glu3-Ala5	6.1 8.7 9.8 7.4 8.2 8.0
4. CRERA		-16.8	0.4	1.9	-14.5	0.0	Cys1-Glu3 Cys1-Arg4 Cys1-Ala5 Arg2-Arg4 Arg2- Ala5 Glu3-Ala5	4.7 7.6 11.5 6.3 9.8 7.8
5. SREKA		-15.2	2.2	2.7	-10.3	4.2	Ser1-Glu3 Ser1-Lys4 Ser1-Ala5 Arg2-Lys4 Arg2-Ala5 Glu3-Ala5	5.8 5.7 9.7 5.5 8.1 6.3
6. CKEKA		-16.3	8.6	2.8	-4.9	9.6	Cys1-Glu3 Cys1-Lys4 Cys1-Ala5 Glu3-Ala5 Lys2-Lys4 Lys2-Ala5	6.6 8.9 12.0 5.5 5.7 8.5
7. CRDKA		-15.7	4.9	2.5	-5.3	9.2	Cys1-Asp3 Cys1-Lys4 Cys1-Ala5 Arg2-Lys4 Arg2-Ala5 Arg3-Ala5	6.9 10.1 10.4 6.6 7.5 7.0
8. CREKV		-14.7	3.0	3.0	-8.7	5.8	Cys1-Glu3 Cys1-Lys4 Cys1-Val5 Arg2-Lys4 Arg2-Val5 Glu3-Val5	6.0 5.4 6.2 5.7 7.4 6.6
9. SKEKA		-15.8	9.4	2.3	-4.1	10.4	Ser1-Glu3 Ser1-Lys4 Ser1-Alal5 Lys2-Lys4 Lys2-Ala5 Glu3-Ala5	6.6 7.7 10.0 5.9 8.4 5.9

10. SRDKA		-16.5	5.4	1.2	-10.0	4.5	Ser1-Asp3 Ser1-Lys4 Ser1-Alal5 Arg2-Lys4 Arg2-Ala5 Asp3-Ala5	6.8 10.4 13.4 7.1 10.4 6.8
11. SRERA		-17.0	4.4	1.8	-10.8	3.7	Ser1-Glu3 Ser1-Arg4 Ser1-Alal5 Arg2-Arg4 Arg2-Ala5 Glu3-Ala5	6.0 6.2 11.9 6.3 10.3 6.6
12. SREKV		-13.5	1.6	4.1	-7.9	6.6	Ser1-Glu3 Ser1-Lys4 Ser1-Vall5 Arg2-Lys4 Arg2-Val5 Glu3-Val5	6.9 9.3 10.6 5.7 7.6 6.2
13. CKDKA		-9.1	11.0	4.1	-6.0	8.5	Cys1-Asp3 Cys1-Lys4 Cys1-Ala5 Lys2-Lys4 Lys2-Ala5 Asp3-Ala5	6.7 10.9 12.9 7.5 9.6 6.9
14. CKEKV		-15.8	11.5	2.2	-2.2	12.3	Cys1-Glu3 Cys1-Lys4 Cys1-Val5 Lys2-Lys4 Lys2-Val5 Glu3-Val5	6.7 10.2 12.5 7.0 9.9 6.5
15. CRDRA		-13.6	1.8	3.0	-9.8	4.7	Cys1-Asp3 Cys1-Arg4 Cys1-Ala5 Arg2-Arg4 Arg2-Ala5 Asp3-Ala5	6.2 8.0 10.9 7.1 9.9 6.4

16. CRDKV		-16.6	5.8	1.4	-9.4	5.1	Cys1-Asp3 Cys1-Lys4 Cys1-Val5 Arg2-Lys4 Arg2-Val5 Asp3-Val5	6.1 7.8 11.7 7.1 10.5 6.8
17. CRERV		-14.3	2.2	1.7	-10.5	4.0	Cys1-Glu3 Cys1-Arg4 Cys1-Val5 Arg2-Arg4 Arg2-Val5 Glu3-Val5	6.0 7.3 10.8 6.6 9.6 6.0

Как следует из результатов расчета, наименьшим значением полной конформационной энергии обладает аналог CRERA с $E_{полн}$=-14.5 ккал/моль. Аналог CRERA, который содержит остаток лизина вместо аргинина в четвертом положении пептидной цепи (Lys4 $\rightarrow$ Arg4), характеризуется наличием фрагмента Cys1-Glu3 со свернутой структурой во всех низкоэнергетических конформационных состояниях. Основной вклад в стабилизацию структуры пептида вносят невалентные взаимодействия, а также водородные связи между атомами боковых цепей Arg2 и Glu3. Такой же поворот пептидной цепи на участке Cys1-Glu3 характерен для аналога CPEKA, в котором выполнена замена одной из полярных аминокислот на неполярную Arg $\rightarrow$ Pro2 ($E_{отн}$=5.0ккал/моль). Известно, что пролин, у которого нет подвижного бокового радикала, благодаря жестко фиксированной связи N-C^{α}, ограничивает подвижность предшествующего ему остатка. Поэтому во всех конформациях этого аналога с низким значением энергии расстояние между C^{α}-атомами первого и третьего остатков не превышает 4.8Å. В аналоге с наиболее компактной пространственной структурой с заменой Ala5 $\rightarrow$ Val5 (аналог CREKV с $E_{отн}$=5.8ккал/моль) C^{α}-атомы концевых аминокислотных остатков сближены на расстояние, равное 6.2÷6.6Å во всех низкоэнергетических структурах.

Замена цистеина Cys1 на любую другую аминокислоту (аналоги AREKA, SREKA, SRDKA, SRERA и SREKV) приводит к формированию конформаций, полная энергия которых варьирует в пределах значений 2.7÷5.6ккал/моль. Так, например, аналог AREKA ($E_{отн}$=2.7ккал/моль), в котором выполнена замена Cys1$\rightarrow$Ala1, может реализовывать в условиях неявно заданного водного окружения 7 конформационных состояний, относительная энергия которых лежит в интервале 0÷5ккал/моль. Конформация с минимальным значением полной энергии характеризуется полусвернутой структурой, которая энергетически более предпочтительна по сравнению с полностью свернутыми (или полностью развернутыми) конформациями на ~3÷5ккал/моль (Таблица 2). Наибольший вклад в стабилизацию структуры вносят невалентные взаимодействия, энергия которых составляет -16.2ккал/моль. Сопоставление полученных данных с результатами расчетов природного пептида CREKA [9-11] показало, что замена полярной аминокислоты Cys1 на неполярную Ala1 существенно не повлияла на конформационную подвижность пептида. Низкоэнергетические конформационные состояния стабилизированы, как и в природном пептиде, водородными связями между положительно заряженной NH_2-группой Arg2 и COO^--группой остатка

Glu3. Аналогичная ситуация выявлена для аналога SRDKA ($E_{отн}$=4.5 ккал/моль), который содержит две замены-в первом (Cys1 → Ser1) и третьем положениях (Glu→Asp3) пептидной цепи. Несмотря на наличие большого числа энергетически выгодных контактов между валентно несвязанными атомами во всех низкоэнергетических конформационных состояниях, вклад от энергии электростатических взаимодействий варьирует в пределах 3.8÷8.4ккал/моль, а относительная энергия глобальной конформации (конформации с минимальным значением полной конформационной энергии) составляет 4.5ккал/моль. Аналог SRERA ($E_{отн}$=3.7ккал/моль) также содержит две замены в последовательности аминокислотных остатков Cys1 → Ser1 и Lys4 → Arg4. Аналог характеризуется вытянутой структурой основной цепи, в которой боковые цепи Arg2 и Arg4 ориентированы в противоположные стороны. Конформационные состояния пептида SREKV, который в дополнение к замене Cys1 → Ser1 содержит остаток валина вместо аланина в пятом положении цепи (Ala5 → Val5) на 5.6 ккал/моль отличаются от конформации с минимальным значением энергии. Эти конформации относятся как к развернутым, так и свернутым типам структур с расстояниием между C^{α}-атомами Ser1 и Val5, равным 10.6Å. Таким образом, замена в первом и последнем положении пептидной цепи полярной аминокислоты на неполярную, также как замена аланина на валин не оказывает существенного влияния на структуру пептидов.

Диаметрально противоположная картина наблюдается в случае, когда происходит моно-и ди-замещения аргинина во втором положении пептидной цепи. Как следует из результатов расчета, относительная конформационня энергия таких аналогов (CKERA, CKEKA, CKDKA и CKEKV) варьирует в пределах 7.4÷12.3ккал/моль. Так, например, в аналоге CKERA ($E_{отн}$=7.4ккал/моль) замена аминокислотных остатков в двух положениях пептидной цепи Arg2 → Lys4 и Lys4→Arg4 приводит к резкому увеличению энергии электростатических взаимодействий на 3.3ккал/моль во всех рассчитанных структурах. Относительная энергия аналогов варьирует в интервале значений 0÷5ккал/моль. Резкое увеличение электростатических наталкиваний между объемными боковыми цепями Lys2, Glu3 и Lys4 наблюдается и в случае замены Arg2 на Lys2 в аналоге CKEKA ($E_{отн}$=9.6ккал/моль). Аналог CKDKA ($E_{отн}$=8.5ккал/моль) с заменами Arg2 → Lys2 и Glu3 → Asp3 формирует структуры, которые энергетически менее предпочтительны по сравнению с природным соединением как с точки зрения невалентных, электростатических так и торсионных взаимодействий. Наконец, аналог CKEKV с Arg2 → Lys2 и Ala5 → Val5 обладает наибольшей относительной энергией по сравнению с природным пептидом и другими аналогами ($E_{отн}$=12.3ккал/моль). Причиной является большое число электростатических наталкиваний атомов в боковых цепях Lys2 и Lys4. Аналог не содержит устойчивых элементов в своей структуре.

В аналоге CRDRA ($E_{отн}$=4.7ккал/моль) выполнены две замены-глутаминовая кислота заменена на аспарагиновую кислоту (Glu3 → Asp3) и лизин замен на аргинин (Lys4→Arg4). Низкоэнергетические конформации характеризуются вытянутой структурой, а в глобальной конформации расстояние между C^{α}-атомами Cys1 и Ala5 равно 10.9Å. В аналоге CRDKV ($E_{отн}$=5.1 ккал/моль) в результате замены Glu3→Asp3 и Ala5→Val5 происходит уменьшение вкладов от электростатических взаимодействий.

нергетически невыгодными являются замены глутаминовой кислоты Glu3→Asp3 (аналог CRDKA с $E_{отн}$=9.2ккал/моль) как по энергии невалентных, так и электростатических взаимодействий. В отличие от всех предыдущих аналогов аналог SKEKA ($E_{отн}$=10.4ккал/моль) с заменами Cys1→Ser1 и Arg2→Lys2

содержит во всех низкоэнергетических состояниях относительно стабильный фрагмент Glu3-Ala5, на котором C^{α}-атомы 3-го и 5-го аминокислотного остатка сближены на расстояние 4.8Å. Аналог CRERV ($E_{отн}$=4.0ккал/моль) с заменами Lys4→Arg4 иAla5→Val5 формирует структуры, которые энергетически менее предпочтительны по сравнению с природным соединением как с точки зрения невалентных, электростатических так и торсионных взаимодействий.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обобщая результаты исследования, можно заключить, что структуры, содержащие остаток аргинина (вместо лизина) в 4-ом положении пептидной цепи молекулы CREKA способны формировать наиболее низкоэнергетические конформационные состояния. Конформация аналога CRERA с минимальным значением энергии на 3.2ккал/моль энергетически более предпочтительна по сравнению с природным пептидом и содержит конформационно устойчивый фрагмент Cys1-Glu3. Однако замена аргинина во втором положении пептидной цепи на Pro2 или Lys2 сопровождается резким увеличением конформационной энергии вплоть до 12.3ккал/моль, что свидетельствует о том, что аргинин во втором положении пептидной цепи играет ключевую роль в формировании низкоэнергетических конформационных состояний пептида. Из всех рассчитанных структур наиболее компактной структурой обладает аналог CREKV (относительная энергия 5.8ккал/моль). Полученные результаты будут использования для моделирования структуры комплексов аналогов пептида CREKA с оксидом железа и ди-глюкозой для выявления устойчивых молекулярных комплексов, используемых для транспорта лекарственных препаратов к пораженным участкам тканей различных органов.

1. У.Буркерт, Н.Аллинжер, *Молекулярная механика,* (1986) 364.
2. Г.И.Кобзев, *Применение неэмпирических и полуэмпирических методов в квантово-химических расчетах*, (2004) 150.
3. Дж.Сигал, *Полуэмпирические методы расчета электронной структуры*, **1** **(**1980) 327.
4. E.M. Popov, I*nt. J. Quantum Chem*., **16** (1979) 707.
5. E.M. Попов, *Структурная организация белков*, (1989) 352.
6. D.Simberg, T.Duza, J.H.Park, M.Essler, J.Pilch, L.Zhang, A.M.Derfus, M.Yang, R.M. Hoffman, S.Bhatia, M.J.Sailor, E.Ruoslahti, *PNAS, January*, **104** (2007) 932.
7. Z.A.Flores-Ortega, A.I.Jimnez, M.I.Calaza, C.Cativiela, R.Nussinov, E.Ruoslahti, C.Alemn, *J. Phys. Chem.,* **B 113** (2009) 22.
8. S.M.Steiert, J.Talmadge, A.Derfus, S.Barry, *Drug Development Res*., **7** (2006) 70.
9. И.Н.Алиева, Г.Д.Аббасова., Н.М.Годжаев, *Bakı Universitetinin Xəbərləri (fizika-riyaziyyat elmləri seriyası),* **4** (2007) 166.
10. Н.М.Годжаев, Г.Д. Аббасова, И.Н.Алиева, *J. Qafqaz University,* **21** (2008) 30.
11. И.Н.Алиева, Г.Д.Аббасова., Н.М.Годжаев, *Application of Information and Communication Technologies (AICT), International Conference,* (2009) 148.
12. Г.М.Липкинд, С.Ф.Архипова, Е.М.Попов, *Журнал структурной химии,* **11** (1970) 121.
13. F.A.Momany, R.F.McGuire, A.W.Burgess, H.A.Scheraga, *Phys. Chem.,* **79** (1975) 2361.
14. И.С.Максумов, Л.И.Исмаилова, Н.М.Годжаев, *Журнал структурной химии,* **24 (**1983) 147.

15. IUPAC-IUB, Quantity*, Units and Symbols in Physical Chemistry, Blackwell Scientific Publications, Oxford,* **39** (1988).
16. Алиева И.Н., Велиева Л.И., Алиев Д.И., Годжаев Н.М., *Ж. Биофизика, Москва*, "Наука"**, 50** (2005) 197.
17. I.N.Alieva, L.I.Velieva, M.A.Musayev, N.M.*Gojayev., Journal of Protein and Peptide Letters (PPL), Bentham Science Publishers Ltd*., **13 (**2006) 1007.
18. I.N.Alieva, N.N.Mustafaeva, N.M.Gojayev, *Journal of Molecular Structure,* **785 (**2006) 76.

CREKA PEPTİDİNİN ANALOQLARININ FƏZA QURULUŞU VƏ KONFORMASİYA XASSƏLƏRİ

G.C.ABBASOVA, İ.N.ƏLİYEVA, Ə.İ.ÖMƏROVA, N.M.QOCAYEV

Molekulyar mexanikanın atom-atom potensial funksiyalar yaxınlaşması metodu ilə CREKA peptidində amin turşu qalıqlarının əvəzlənmə yolu ilə alınan analoqlarının onun quruluşuna və konformasiya xassələrinə göstərdiyi təsir öyrənilmişdir.

SPATIAL STRUCTURE AND CONFORMATIONAL PROPERTIES OF THE CREKA PEPTIDE ANALOQS

G.D.ABBASOVA, I.N.ALIEVA, A.I.OMAROVA, N.M.GOJAYEV

The effect of the amino acid mutation on the spatial structure and conformational properties of the CREKA peptide analogs has been investigated by using of the atom-atomic potential functions by the method of molecular mechanics.

Редактор: Т.Гусейнов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ОПТИЧЕСКИЕ КОНСТАНТЫ ХАЛЬКОГЕНИДНОЙ СТЕКЛООБРАЗНОЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ СИСТЕМЫ Se-As, СОДЕРЖАЩЕЙ ПРИМЕСИ ФТОРИДА ЕВРОПИЯ (EuF_3)

А.И.ИСАЕВ, С.И.МЕХТИЕВА, С.Н.ГАРИБОВА, Р.И.АЛЕКПЕРОВ, В.З.ЗЕЙНАЛОВ

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр.Г.Джавида, 33

Исследованием оптических свойств ХСП состава $Se_{95}As_5$ с различным содержанием примесей фторидов редкоземельных элементов (EuF_3) определены такие фундаментальные параметры, как показатель преломления, коэффициент экстинкции. Зависимость этих величин от концентрации молекул EuF_3 носит немонотонный характер: малые концентрации (до 0,25ат%) уменьшают, а большие увеличивают их значения. Анализируя полученные результаты, а также учитывая структурные особенности ХСП системы $Se_{95}As_5$, т.е. наличие упорядоченных микрообластей с высоким координационным числом, отдаленных друг от друга областями с пониженной атомной плотностью сделан вывод, что оптические свойства указанной ХСП можно описывать в рамках модели Пенна.

Халькогенидные стеклообразные полупроводники (ХСП) привлекают внимание исследователей как перспективные материалы для использования в различных электрических переключателях, запоминающих устройствах, в инфракрасной технике, а также в различных акустооптических устройствах[1-3]. Это, прежде всего, связано с тем, что ХСП материалы обладают рядом свойств, присущих только этим материалам. Они обладают способностью изменять свои электрические, фотоэлектрические и оптические свойства под действием света, т. е. изменять показатель преломления света, край оптического поглощения, а также у них появляются неспаренные спины, регистрируемые электронным спиновым резонансом, обладают фотолюминесценцией со стоксовым сдвигом, усталостью параметров и т.д. Привлекательность ХСП материалов обусловлена еще с тем обстоятельством, что у них подавляющее большинство локальных состояний связано с заряженными дефектами D^- и D^+ (U^--центрами с отрицательной эффективной энергией корреляции электронов), концентрацию которых можно контролировать введением примесных атомов, проявляющуюся в виде заряженных центров. Это позволяет существенно улучшить параметры переноса электрического заряда и фоточувствительность [4-9].

Использование фторида редкоземельных элементов (EuF_3) в качестве примесей обусловлено двумя особенностями указанных атомов. Во-первых, они проявляются, в основном, в виде заряженных центров (ионы Eu^{3+} и F^-) и должны влиять на концентрацию U^--центров. Во-вторых, в запрещенной зоне ХСП создают состояния, обусловленные их 4f состояниями, вследствие чего оптическая ширина запрещенной зоны ХСП перекрывается по энергии электронными переходами, разрешенных для иона РЗЭ (Eu), что должно приводить к существенному изменению его оптических, фотоэлектрических и электрических свойств [7-10]. Понимание механизмов электронных процессов, ответственных за вышеперечисленные особенности требует комплексного исследования структуры и физических свойств.

Настоящая работа посвящена исследованию оптических свойств ХСП состава $Se_{95}As_5$, содержащего примеси EuF_3, в частности, определению таких фундаментальных параметров, как оптическая ширина «запрещенной зоны», показатель преломления, а также коэффициент экстинкции, которые тесно связаны с атомной и электронной структурой материала и энергетическим спектром электронных состояний. Знание указанных параметров также очень важно для

проверки перспективности материала в целях оптоэлектроники. Выбор указанного ХСП состава обусловлен тем, что он как по структуре, так и по электронным свойствам наиболее стабилен [4].

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И ИЗГОТОВЛЕНИЕ ОБРАЗЦОВ

Синтез ХСП состава $Se_{95}As_5$ с примесью EuF_3 осуществлялся сплавлением соответствующих количеств химических элементов особой чистоты в вакуумированных кварцевых ампулах при температурах выше 900˚С во вращающейся печи с последующим охлаждением в режиме выключенной печи. Примесь вводилась в процессе синтеза, концентрация ее изменялась в пределах 0,001÷1ат%.

Спектры оптического пропускания исследованы методом двухлучевой спектроскопии в интервале энергий 1÷2,8эв. Все эксперименты проведены при комнатной температуре.

Образцы для измерений представляли собой слои толщиной 0,5мкм÷2мм. Тонкие слои были изготовлены методом термического испарения вещества в вакууме 10^{-6}мм рт. ст. на стеклянные подложки.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На Рис.1 приведены спектры оптического пропускания $Se_{95}As_5$ с различным содержанием примеси EuF_3. Как видно из рисунка, начиная от значения длины волны падающего света 650нм, в спектрах наблюдаются интерференционные максимумы и минимумы, что позволяет вычислить такие оптические коэффициенты, как показатель поглощения и коэффициент экстинкции по способу, предложенному в работе [11].

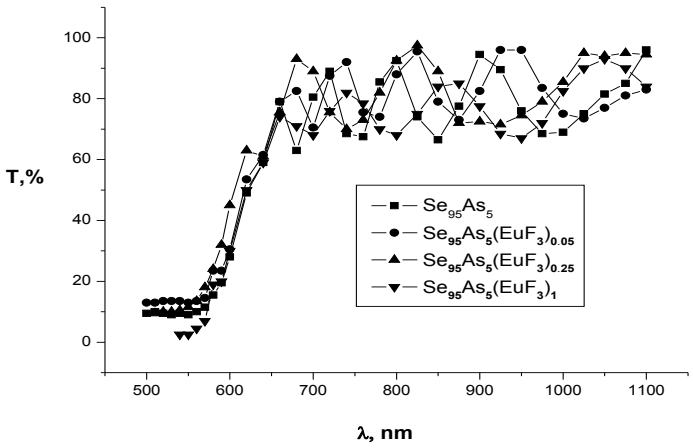


Рис. 1.

Спектры оптического пропускания ХСП состава $Se_{95}As_5$ с различным содержанием примеси EuF_3.

Согласно [11] показатель преломления в участке спектра, соответствующего энергии фотона, где свет слабо поглощается, выражается формулой

$$n=[N+(N^2-S^2)^{1/2}]^{1/2}, \quad (1)$$

где

$$N = 2S(T_M - T_m)/(T_M T_m) + ½(S^2 + 1). \quad (2)$$

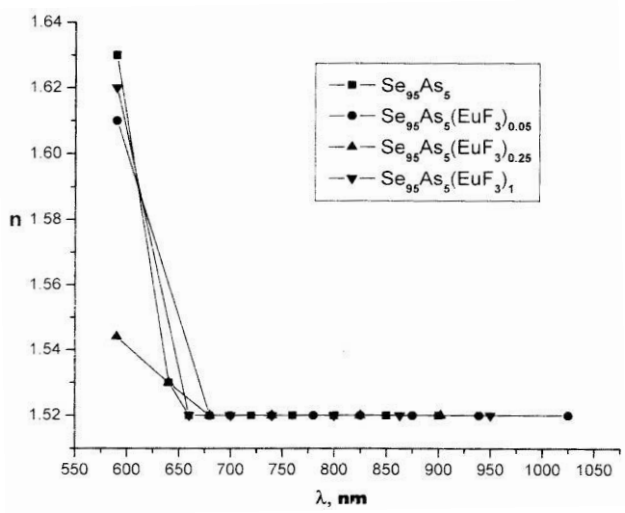
T_M и T_m значения коэффициента пропускания, соответствующие интерференционным максимумам и минимумам, соответственно.

Коэффициент экстинкции k вычислен по формуле

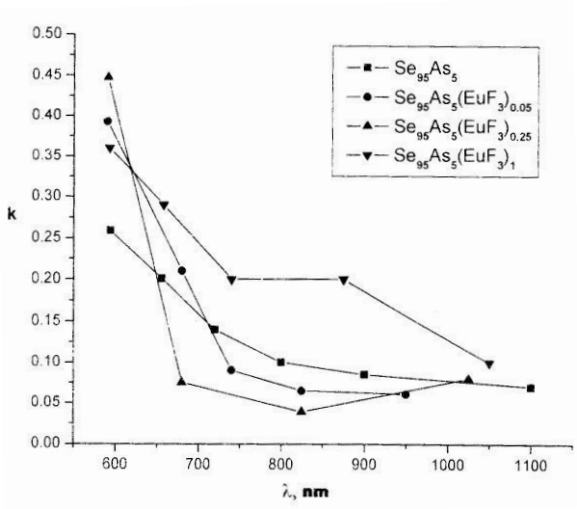
$$k=\frac{\alpha\lambda}{4\pi}. \quad (3)$$

Спектральные зависимости показателя преломления (n) коэффициента

экстинкции (k) $Se_{95}As_5$ с различным содержанием примеси EuF_3 приведены на Рис.2. Как видно, при изменении содержания примеси значения коэффициентов n и k до значения длины волны падающего света $\lambda \approx 650$nm монотонно уменьшается с ростом длины волны, а ее дальнейшее увеличение не влияет на эти величины. На Рис.3 показаны зависимости показателя преломления (а) и коэффициента экстинкции (б) $Se_{95}As_5$ от концентрации молекул EuF_3.



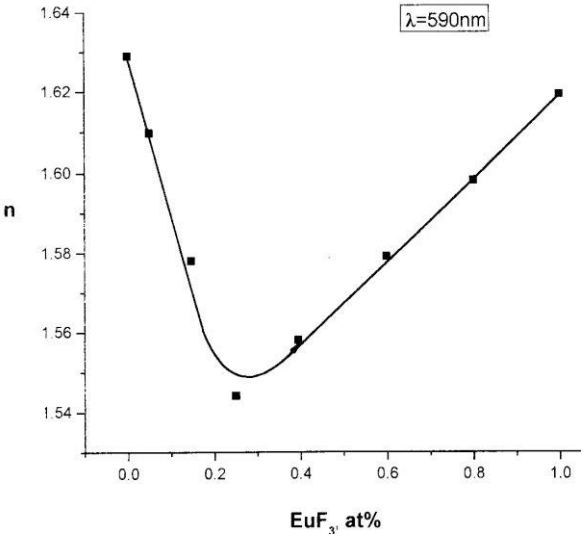
а



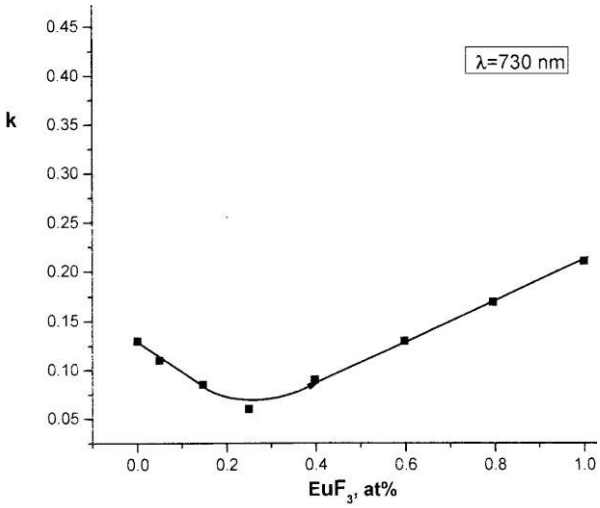
б

Рис.2

Спектральные зависимости ХСП состава $Se_{95}As_5$ с различным содержанием примеси EuF_3: а) показателя преломления; б) коэффициента экстинкции.



а



б

Рис.3

Зависимости показателя преломления (а) и коэффициента экстинкции (б) ХСП состава $Se_{95}As_5$ от концентрации EuF_3.

Видно, что влияние примеси EuF_3 на значения коэффициентов n и k носит немонотонный характер: до значения концентрации ~0,25ат% значения n и k уменьшаются, а дальше наблюдается некоторый их рост. Как видно из Рис.2б, край оптического поглощения до значения концентрации примеси ~0,25ат% смещается в коротковолновую сторону, а при дальнейшем увеличении - в длинноволновую.

На Рис.4 представлена зависимость ширины зоны Пенна $Se_{95}As_5$ от концентрации молекул EuF_3, определяемая из Рис. 2б. Видно, что влияние примесей на значение ширины зоны Пенна носит сложный характер: низкая концентрация (до 0,25ат%) увеличивает, а высокая постепенно уменьшает ее, что свидетельствует о сложности влияния примесных молекул EuF_3 на концентрацию локализованных состояний в щели подвижности. Судя по графикам, представленным на Рис.3 и Рис.4, можем утверждать, что малая концентрация примесных молекул EuF_3 уменьшает, а высокая концентрация увеличивает плотности локализованных состояний в щели подвижности исследуемого материала.

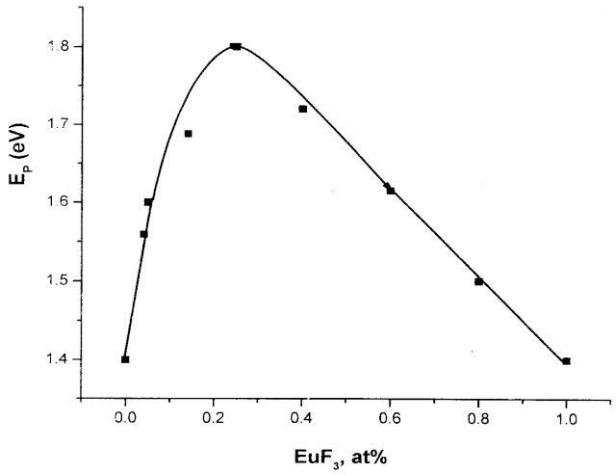


Рис.4.

Зависимость ширины зоны Пенна ХСП системы $Se_{95}As_5$ от концентрации молекул EuF_3.

Для объяснения полученных результатов следует обратить внимание на структурные особенности расположения атомов и энергетический спектр электронных состояний в $Se_{95}As_5$, также изменения, происходящие в них при введении примесей фторидов редкоземельных элементов. Согласно [12] ХСП материалы типа, например, селенид мышьяка, к которым можно отнести и ХСП составы $Se_{95}As_5$, обладают менее лабильной и более жесткой структурой, вследствие чего в указанных материалах формируются упорядоченные микрообласти с высоким координационным числом, отдаленные друг от друга областями с пониженной атомной плотностью. Такое различие в расположении атомов приводит к тому, что микроскопическая плотность (ρ) у границы микрообласти с высоким координационным числом становится меньше, чем внутри самой области, что позволяет провести интерпретации полученных результатов в рамках модели Пенна, развитой для материалов, содержащих поры малых размеров[13]. Согласно[13] статический показатель преломления n_0 связан с плазменной частотой ω_p и энергетической зоной Пенна $\hbar\omega_g$

$$n_0^2 = 1 + 2/3\,(\omega_p/\omega_g), \qquad (4)$$

где величина $\hbar\omega_g$ совпадает с максимумом спектра к(ω), ω_p выражается через формулы

$$\omega_p^2 = (4\pi e^2/m).(\rho N_A/A).\,n_V, \qquad (5)$$

где e и m – заряд и масса электрона, ρ - плотность материала, A – молекулярная масса, N_A – число Авогадро, n_V – число валентных элекронов на атом.

Согласно [14] ширина запрещенной зоны в рамках модели Пенна $\hbar\omega_g$ должна уменьшаться как квадрат среднего координационного числа C, а плазменная энергия $\hbar\omega_p$, соответствующая коллективному возбуждению электронного газа, локализованного, в основном, в плотных областях случайной сетки с высоким координационным числом, как квадратный корень из макроскопической атомной плотности ρ. Уравнение (4) при этом, например, для a-Si имеет такой вид [15]

$$n^2 = 1 + 2/3\,(\omega_p/\omega_g).(\rho/\rho^0)^{1-4f}, \qquad (6)$$

где $f = d\ln C/d\ln\rho$, C – среднее координационное число, индекс “нуль” обозначает параметр полностью координированного вещества.

Если принять, что введенные EuF_3 проявляются в виде ионов Eu^{3+} и F^- и в малых количествах, в основном, заполняют существующие пустоты, то они будут способствовать устранению неоднородностей, связанных с дефицитом плотности в указанных областях и одновременно, благодаря химической активности, способствуют образованию структурного элемента типа $EuSe_3$, SeF_6, вследствие чего уменьшится концентрация оборванных связей, сопровождаемое уменьшением плотности локализованных состояний в щели подвижности, связанные с заряженными дефектами (U^--центрами) и ослаблением флуктуаций электростатического потенциала. Последние факторы приводят к постепенному уменьшению показателя преломления и коэффициента экстинкции (Рис.3), а также к увеличению ширины зоны Пенна (Рис.4). При больших концентрациях примесных молекул EuF_3, ионы Eu^{3+} и F^- распределяются по всей матрице, и в щели подвижности $Se_{95}As_5$ образуются новые локальные состояния, связанные с ионами Eu^{3+} и F^-, приводящие к усилению флуктуаций электростатического потенциала. Последние факторы приводят к постепенному увеличению показателя преломления и коэффициента экстинкции (Рис.3), а также к уменьшению ширины зоны Пенна (Рис.4).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из рассуждений, приводимых в настоящей работе, можем считать, что влияние примеси EuF_3 на оптические свойства ХСП системы $Se_{95}As_5$ связаны с изменениями, происходящими в атомной структуре и энергетическом спектре электронных состояний, и описывается в рамках модели Пенна. Структурные особенности $Se_{95}As_5$, т.е. наличие упорядоченных микрообластей с высоким координационным числом, отдаленных друг от друга областями с пониженной атомной плотностью, обусловливают сложный характер влияния примеси EuF_3 на такие оптические параметры как коэффициент оптического поглощения, показатель преломления и коэффициент экстинкции. Считая, что примесь EuF_3 проявляется в виде ионов Eu^{3+} и F^- и в малых количествах, в основном, наполняя существующие пустоты, устраняет неоднородности, связанные с дефицитом плотности в указанных областях и одновременно благодаря химической активности способствуют образованию структурного элемента типа $EuSe_3$, SeF_6, вследствие чего уменьшается концентрация оборванных связей, сопровождаемая уменьшением плотности локализованных состояний в щели подвижности, связанные заряженными дефектами (U^- -центрами). При больших концентрациях примесных молекул EuF_3 ионы Eu^{3+} и F^-распределяются по всей матрице, и в щели подвижности ХСП состава $Se_{95}As_5$ образуются новые локальные состояния, связанные с ионами Eu^{3+} и F^-, приводящие к усилению флуктуаций электростатического потенциала. Такое поведение примесных атомов приводит к немонотонному изменению показателя преломления и коэффициента экстинкции, а также ширины зоны Пенна в зависимости от концентрации примесных молекул EuF_3.

1. К.Д.Цендин, *Электронные явления в халькогенидных стеклообразных полупроводниках*, *Санкт – Петербург*, (1996) 320.
2. Tanaka Keiji, *Nonlinier Optics in Glasses*: *7th Int. Conf. On Solid State Chemistry. Czech Rep., Pardubice,* (2006) 60.
3. A.Zakery, S.R.Elliott, J. Non-Cryst. Sol., 330 (2003) 1.
4. А. И. Исаев, Л.П. Казакова, Э.А.Лебедев, С.И.Мехтиева, И.И.Ятлинко, *Способ получения халькогенидных стеклообразных полупроводников на основе Se – As,* А.С.№ 1512015. *Москва*,(1989).

5. Л.П.Казакова., Э.А.Лебедев, А.И.Исаев, С.И.Мехтиева, Н.Б.Захарова, И.И.Ятлинко, *ФТП*, **27** (1993) 959.
6. L.P.Kazakova, E.A.Lebedev, N.B.Zakharova, I.I.Yatlinko, A.I.Isayev, S.I.Mekhtiyeva, *J. of Non – Cristalline solids*, **167** (1994) 65.
7. A.I. Isayev, S.I.Mекhtiyeva, A.K.Rzayev, *Turkish J. of Physics,* **22** (1998) 263.
8. A.I. Isayev, S.I.Mekhtieva, N.Z.Jalilov, R.I, Alekperov, *Solid State Communications,* **149** (2009) 45.
9. A.I.Isayev, S.I.Mekhtieva, N.Z.Jalilov, R.I.Alekperov, V.Z.Zeynalov, *J.of Optoelectronics and Advanced Materials-RC*, 1 ISS, **8** (2007) 368.
10. Я.Г.Клява, *ФТТ,* **27** (1985) 1350.
11. R.Swanpoel, *J.Phys.E. Sci Instrum*, **16** (1983)121.
12. A.I.Popov, *Semiconductors and Semimetals*, **78** (2004) 51.
13. *Физика гидрогенизированного аморфного кремния. Вып. 2: Электронные и колебательные свойства. Под ред. Дж. Джоунопулоса, Дж. Люковски*, *М.*, *Мир*, (1988) 447.
14. J.C.Phillips, *Phys. Status. Solidi*, **b44** (1971) K1.
15. N.J.Shevchik, W.Paul, *J. Non – Crist.Solids*, **16** (1974) 55.

EVROPİUM FTOR (EuF_3) AŞQARLARI ƏLAVƏ EDİLMİŞ ŞÜŞƏVARİ HALKOGENİD YARIMKEÇİRİCİ Se-As SİSTEMİNİN OPTİK SABİTLƏRİ

A.İ.İSAYEV, S.İ.MENDİYEVA, S.N.QƏRİBOVA, R.İ.ƏLƏKBƏROV, V.Z.ZEYNALOV

Optik xassələrinin tədqiqinə əsasən müxtəlif miqdarda evropium ftor (EuF_3) aşqarları əlavə edilmiş şüşəvari halkogenid $Se_{95}As_5$ yarımkeçiricisinin optik sındırma və ekstinksiya əmsalı kimi fundamental parametrləri təyin edilmişdir. Göstərilmişdir ki, EuF_3 aşqarlarının həmin parametrlərə təsiri monoton olmayan xarakterə malikdir.Kiçik konsentrasiyalar (0.25% qədər) göstərilən kəmiyyətlərin qiymətini azaldır, böyük konsentrasiyalar isə artırır.

$Se_{95}As_5$ şüşəvari halkogenid yarımkeçirici sisteminin quruluş xüsusiyyətlərini, yəni atomların sıxlığı az olan oblastlarda bir-birindən ayrılmış yüksək koordinasiya ədədli nizamlı oblastların mövcudluğunu nəzərə alaraq alınmış nəticələr Penn modelinə uyğun olaraq izah edilmişdir.

OPTICAL CONSTANTS OF CHALCOGENIDE GLASS-LIKE SEMICONDUCTOR OF Se-As SYSTEM DOPED BY EuF_3

A.I.ISAYEV, S.I.MEKHTIYEVA, S.N.GARIBOVA, R.I.ALEKPEROV, V.Z.ZEYNALOV

By investigation of optical properties of $Se_{95}As_5$ composition CGS with different content of rare-earth fluoride element (EuF_3) impurity there has been determined such fundamental parameters as refractive index and extinction coefficient. Dependence of these values on EuF_3 molecule concentration has nonmonotonic behaviour: small concentrations (up to 0.25 at %) decrease their values and big ones increase their values. Analyzing the obtained results and also taking into consideration CGS of $Se_{95}As_5$ system structural pecularities, i.e. presence of ordered microregions with high coordination number, remote from one another by regions with low atomic density it is concluded that optical properties can be explained within Penn model.

Редактор: Т.Керимова

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ $Bi_{0.88}Sb_{0.12}$ ЛЕГИРОВАННЫХ ТЕЛЛУРОМ

Б. А.ТАИРОВ, О.И.ИБРАГИМОВА, С.З.ДАМИРОВА, Т.Ф.ЮСИФОВА

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33

Измерены компоненты удельного электросопротивления ρ_{ij}, коэффициентов Холла $R_{ijк}$ и магнетосопротивления $\rho_{ij,kl}$ монокристаллических образцов n-$Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ легированных теллуром в количестве 0,01; 0,1; 0,2at.% в интервале температур 77÷300К.

Установлено наличие дополнительной долины в зоне проводимости. Расчеты показали, что энергетическое расстояние между долинами в зоне проводимости составляет 40мэВ.

Найдено, что отношение эффективных масс тяжелых и легких электронов равно трем.

ВВЕДЕНИЕ

В течение последних нескольких лет возрос интерес к висмуту и сплавам $Bi_{1-x}Sb_x$ [1-5]. Малое значение теплопроводности и малая эффективная масса электронов в твердых растворах $Bi_{1-x}Sb_x$ позволяют применять их в датчиках ИК излучения и термоэлектрических генераторах, характеристики которых непосредственно связаны с энергетическим спектром носителей заряда.

Легирование полуметаллов, полупроводников и их твердых растворов донорными и акцепторными примесями широко применялось для исследования структуры энергетического спектра носителей заряда вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны, т. к. смещая легированием уровень Ферми можно заполнять преимущественно либо электронные, либо дырочные состояния, тем самым упростить расчеты зонных параметров. Однако оставалось неясным, в какой мере дают о себе знать вышележащие энергетические долины. Можно предполагать, что рассеяние электронов в вышележащие долины, а тем более продвижение в них уровня Ферми, будет все более проявляться в гальваномагнитных характеристиках с повышением степени легирования. Поэтому в данной работе проводилось исследование гальваномагнитных эффектов в n-$Bi_{1-x}Sb_x$ для выявления роли дополнительных энергетических долин электронов в этих кристаллах.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Нами разработана методика [6] равномерного легирования монокристаллов твердых растворов висмут-сурьма теллуром и оловом в процессе их вытягивания из расплава с твердой подпиткой.

Компоненты электропроводности, магнетосопротивления и коэффициента Холла измерялись при постоянном токе в магнитных полях 0÷2кЭ. Измерения проводились в соленоиде, область однородного поля в котором по оси его составляет 15÷20см, внутренний диаметр соленоида 10см, что позволяет без труда работать в обычных криостатах и обеспечить практически полную однородность поля.

Требования к держателю образца определялись следующим: необходимо обеспечить плавное изменение температуры в интервале 77÷300К, минимальный градиент температуры в образце и возможность точной угловой ориентации образца относительно направления магнитного поля. Схема держателя образцов приведена в [7].

Держатель заполняется гелием, что дополнительно уменьшает градиенты температур. В целом держатель обеспечивает градиент температур не более 0,03º. Следует отметить, что несмотря на сведение градиента температур к минимуму из-за эффекта Пельтье, значительного в сплавах Bi-Sb, в измерения сопротивления

вносится погрешность порядка 3÷5%. Эта погрещность исключается применением мгновенного измерения на электронно-цифровом волтьметре (ВК2-20).

При измерениях коэффициента Холла и магнетосопротивления влияние эффекта Пельтье легко исключается путем проведения измерений при двух направлениях манитного поля и измерением с полем и без поля, соответственно. Поэтому эти измерения проводятся на обычном потенциометре.

Необходимо отметить, что приводимые в работе значения коэффициентов соответствуют условиям слабого магнитного поля. Для получения таких значений всегда снималась зависимость соответствующего гальваномагнитного коэффициента от поля. При этом проверялось условие слабого магнитного поля, т. е. независимость от поля коэффициентов $R_{ijк}$ и $\rho_{ij,kl}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Наиболее активными донорными примесями в Bi и сплавах $Bi_{1-x}Sb_x$ являются шестивалентные элементы, чаще всего используется теллур, поскольку он хорошо распределяется по обьему кристалла и имеет хорошую эффективность. Здесь под термином эффективность подразумевается концентрационная эффективность – изменение концентрации элетронов одним атомом примеси. Ряд авторов априори принимали полную ионизацию примеси. Действительно, можно ожидать, что донорная примесь будет иониризированна при самых малых температурах, поскольку небольшая эффективная масса электронов (0,05 в L долине) и большая диэлектрическая проницаемость (ε~100÷200) обусловливают очень малую энергию связи на кулоновском потенциале. Однако некоторые исследования Bi, легированного Te показывают, что его эффективность нецелочисленна [8]. Нецелочисленность эффективности примеси может быть связана с ее политропией, подобно обнаруженной в Ge и Si. Часть атомов может не проявлять донорных (или акцепторных) свойств, присутствуя в виде комплексов, атомов внедрения или высаживаясь на деффектах. В этом случае коэффициент эффективности должен зависеть от технологических факторов, концентрации примеси и температуры. Авторы [9] утверждают, что политропия примеси не проявляется в Bi, по крайней мере, до ее концентраций 0,1at.%. Удобнее исследовать примесь в сплавах $Bi_{1-x}Sb_x$, поскольку для заметного изменения концентраций носителей заряда нужны значительно меньшие концентрации примеси.

В Таблице приводятся экспериментальные значения слабополевых гальваномагнитных коэффициентов для твердых растворов висмут-сурьма с содержанием сурьмы 12at.% при различных содержаниях теллура в качестве легирующей примеси.

Как видно из Таблицы 1, сравнение компонентов удельного сопротивления, коэффициента Холла и магнетосопротивления нелегированного сплава и легированных теллуром показывает, что по мере увеличения содержания теллура все эти величины уменьшаются. Причем, если удельное сопротивление уменьшается в несколько раз, то компоненты коэффициента Холла уменьшаются на порядок, а магнетосопротивление – на два порядка. Такой характер изменения гальваномагнитных коэффициентов уже качественно свидетельствует об увеличении концентрации носителей заряда с одновременным уменьшением их подвижности, а также участием в явлениях переноса более тяжелой электронной зоны. Как видно из таблицы и литературы [7], анизотропия сопротивления A ($A=\rho_{33}/\rho_{11}$) больше единицы для висмута и меньше единицы для сурьмы, а в сплаве $Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ приблизительно равна единице.

Таблица 1.

Значения изотермических слабополевых гальваномагнитных коэффициентов для собственного и легированных Te $Bi_{0,88}Sb_{0,12}$, при T=77K.

компоненты	$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$	$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$ +0,01 at. % Te	$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$ +0,1 at. % Te	$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$ +0,2 at. % Te
№ образца	1	2	3	4
ρ_{11} (Ohm·cm)	2,4(10^4)	5,2(10^{-5})	4,4(10^{-5})	3,8(10^{-5})
ρ_{33} (Ohm·cm)	2,2(10^4)	4,9(10^{-5})	4,9(10^{-5})	4,34(10^{-5})
R_{231} (cm^3C^{-1})	126	1,944	0,32	0,19
R_{123} (cm^3C^{-1})	5,4	0,174	0,05	0,018
$\rho_{11,33}$ (Ohm·cm·Oe^{-2})	0,81(10^9)	0,62(10^{-12})	0,32(10^{-13})	0,56(10^{-14})
$\rho_{33,11}$ (Ohm·cm·Oe^{-2})	1,33(10^8)	2,6(10^{-12})	0,73(10^{-13})	1,37(10^{-14})
$\rho_{11,11}$ (Ohm·cm·Oe^{-2})	0,82(10^8)	7,35(10^{-12})	2,0(10^{-13})	3,6(10^{-14})
$\rho_{11,22}$ (Ohm·cm·Oe^{-2})	1,78(10^8)	8,2(10^{-12})	2,4(10^{-13})	4,3(10^{-14})
$\rho_{33,33}$ (Ohm·cm·Oe^{-2})	4,0(10^{10})	0,46(10^{-12})	0,34(10^{-13})	0,6(10^{-14})

В нелегированном сплаве №1 A≤1. В умеренно легированном сплаве №2 A≤1, что свойственно для L-электронов. В сильно легированных сплавах №3,4 A>1. Заметим, что анизотропия удельного сопротивления A для экстремума L - всегда меньше 1, для экстремума T – больше 1. В сплаве №1 T экстремум по энергетической шкале опускается вниз, и при легировании соответствующие носители вообще не участвуют в явлениях переноса. Наблюдаемая анизотропия при сильном легировании не свойственна ни L, ни H экстремуму. По- видимому, она связана с T экстремумом. Анализ других гальваномагнитных коэффициентов также подтверждает существование предлагаемого экстремума.

На Рис.1, Рис.2, Рис.3 представлены температурные зависимости усреднѐнного удельного сопротивления, коэффициентов Холла и коэффициентов магнето-сопротивления для сплавов $Bi_{0,88}Sb_{0,12}$, легированных теллуром.

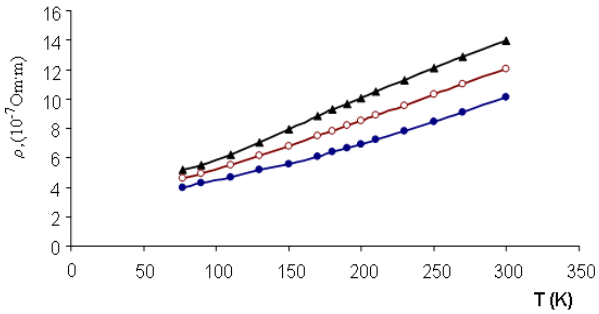


Рис.1.

Температурная зависимость электросопротивления .—▲—$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,01at.%Te,—○—$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,1at.%Te,—•—$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,2at.%Te.

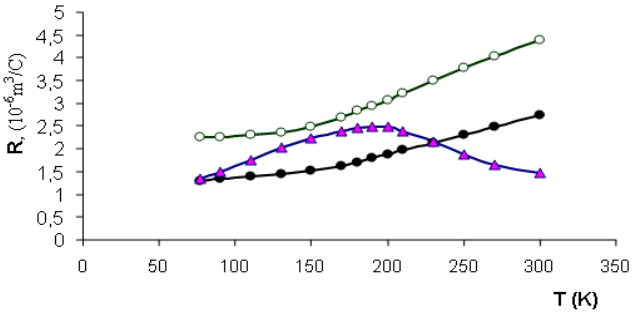


Рис. 2.

Температурная зависимость коэффициента Холла.

—▲—R,$Bi_{0,88}$-$b_{0,12}$+0,01at.%Te,—○—R·0,1,$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,1at.%Te,—•—R·0,1,$Bi_{0,88}Sb_{0,12}$+0,2at.%Te

Усреднение компонентов определяются формулами приведѐнным в [7]. Как видно из рисунков, для сплавов $Bi_{0,88}Sb_{0,12}$+0,01at.%Te сопротивление монотонно растѐт с температурой, и на температурных зависимостях коэффициентов Холла и магнетосопротивления имеются максимумы соответственно 190K и 170K. А в сплаве $Bi_{0,88}Sb_{0,12}$+0,2at.%Te эти коэффициенты монотонно растут с температурой, причѐм на температурных зависимостях R и $\Delta\rho/H^2$ имеются точки перегиба, также

соответствующие температуре 180К. Как видно из сравнения этих зависимостей, для обоих образцов $\frac{d\rho}{dT} > 0$, в то время как $\frac{dR}{dT}$ и $\frac{d}{dT}\left[\frac{\Delta\rho}{H^2}\right]$ для образца №2 отрицательны, а для образца №4 – положительны. Такое различие в зависимостях можно объяснить тем, что сплавы, содержащие менее 0,01at.%Te, являются однотипными только при T≤190К, а при T>190К – смешанными, тогда как составы, содержащие более 0,1at.%Te, имеют один тип носителей заряда во всем температурном интервале.

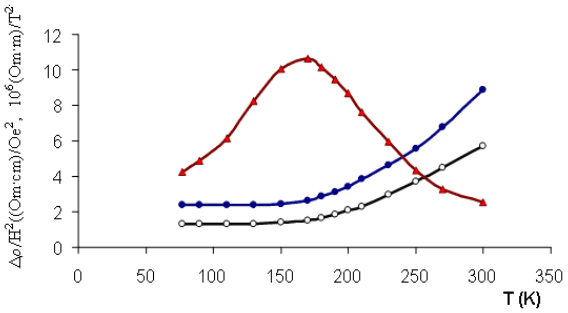


Рис. 3.
Температурная зависимость коэффициента магнетосопротивления.
—▲—$\Delta\rho/H^2 \cdot 10^{-12}$, $Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,01at.%Te,
—○—$\Delta\rho/H^2 \cdot 10^{-13}$, $Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,1at.%Te,
—●—$\Delta\rho/H^2 \cdot 10^{-14}$, $Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,2at.%Te.

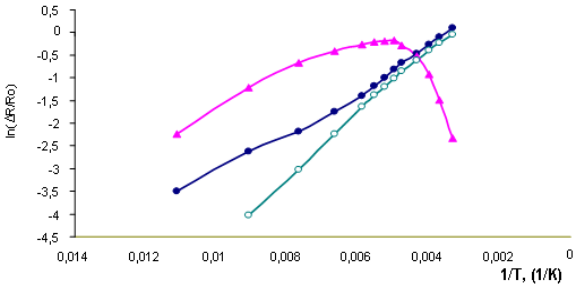


Рис. 4.
Зависимость $\ln(\Delta R/R_0)$ от 1/T. ΔE(0,1)=40meV, ΔE(0,2)=40meV, $\frac{m_2^*}{m_1^*} = 3$, b=0,16.
—▲—$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,01at.%Te,—○—$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,1at.%Te,—●—$Bi_{0,88}$-$Sb_{0,12}$+0,2 at. % Te.

Особый интерес представляет необычный ход коэффициентов Холла и магнетосопротивления. Аналогичная температурная зависимость R наблюдалась и в работе [10]. Такое поведение R(T) и $\Delta\rho/H^2(T)$ может быть обусловлено либо наличием квазилокальных примесных уровней, либо вышележащей зоной проводимости.

В случае существования квазилокальных уровней, росположенных в зоне проводимости, они, начиная с определѐнной температуры, играют роль ловушек для носителей заряда. При этом концентрация носителей с ростом температуры уменьшается, R и $\Delta\rho/H^2$ растут с температурой, а при достижении энергии, достаточной для ионизации этих квазилокальных состояний, концентрация n вновь растѐт, и, следовательно, R и $\Delta\rho/H^2$ уменьшаются.

Характерной особенностью квазилокальных примесных уровней является то, что при достижении уровнем Ферми энергии, соответствующей квазилокальным уровням или полосы квазилокальных состояний, концентрация должна стабилизироваться, т. е. дальнейшее введение примесей или повышение температуры не должно привести к росту концентрации свободных электронов, и уровень Ферми должен стабилизироваться вблизи квазилокального уровня. Однако в наших экспериментах концентрация электронов изменяется в широком диапазоне ($10^{16} \div 10^{20}$см$^{-3}$). Поэтому для объяснения температурных зависимостей коэффициентов Холла и магнетосопротивления надо учесть влияние вышележащей подзоны. При наличии вышележащей подзоны с ростом концентрации, когда уровень Ферми достигает значения энергетического зазора между минимумами зоны проводимости, т. е. попадает в вышележащую подзону, в которой носители имеют большую эффективную массу и, следоватльно, меньшую подвижность, тяжѐлые электроны вносят относительно малый вклад в $R_{ijк}$ и $\rho_{ij,kl}$ и, по мере перехода

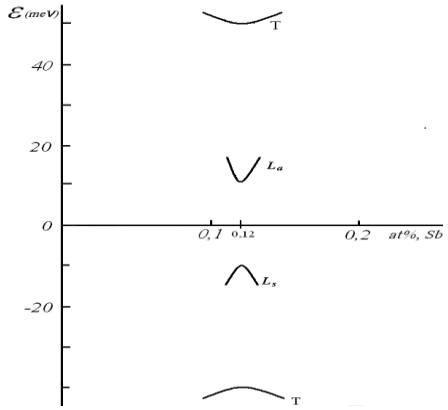
электронов во вторую зону, эффективная концентрация убывает, а коэффициенты Холла и магнетосопротивления растут.

С целью определения параметров вышележащей подзоны использованы данные R(T) в области температур 190÷300K, где вырождение отсутствует (Рис. 4). Согласно двухзонной модели, при отсутствии вырождения R(T) можно вразить в виде [11]

$$\frac{R-R_0}{R_0}=\frac{\Delta R}{R_0}=(1-b^2)\left[\frac{m_2^*}{m_1^*}\right]^{\frac{3}{2}}\exp\left[-\frac{\Delta E_0}{k_0T}\right], \qquad (1)$$

где $R_0=\frac{1}{e(n_1+n_2)}$ - коэффициент Холла в области низких температур, $b=\frac{\mu_2}{\mu_1}$ и $\frac{m_2^*}{m_1^*}$ - отношения подвижностей и эффективных масс плотности состояний тяжѐлых и легких электронов, соответственно.

Отметим, что в (1) изменение коэффициента Холла ΔR обусловлено только перераспределением носителей заряда между подзонами. При расчетах выше 190K превалирующим механизмом рассеяния считалось рассеяние носителей на акустических фононах. По наклону $\ln\frac{\Delta R}{R_0}\sim f(1/T)$ из Рис.4 найдено значение энергетического расстояния между минимумами зоны проводимости и вышележащей подзоны ΔE_0=40±1,8meV и отношение эффективных масс тяжѐлых и легких электронов $m_2^*/m_1^*=3\pm0{,}1$.



Анализ анизотропии электросопротивления, гальваномагнитных коэффициентов, а также приблизительная равность эффективных масс T дырок (m_p=0,164m_0) [12-13] и найденое значение эффективной массы тяжелых электронов (m_n=0.15m_0, позволяют дать схему расположения зон представленных на Рис.5

Рис.5.
Схема расположение энергетеческих зон сплава $Bi_{0.88}Sb_{0.12}$.

Можно заключить, что перенос электронов в зоне проводимости $Bi_{1-x}Sb_x$ в значительной степени определяется близколежащими дополнительными энергетическими долинами. Полученные экспериментальные температурные зависимости удельного сопротивления, коэффициентов Холла и коэффициентов магнетосопротивления служат основой для дальнейших теоретических исследований детального положения и заполнения энергетичесих долин. Результаты расчѐтов составят содержание следующей работы, которая в настояшее время готовится к опубликованию.

1. Lu Li, J.G.Checkelsky, Y.S.Hor, C.Uher, A.F.Hebard, R.J.Cava, N.P.Ong, Science *journal,* **321** №5888 (2008) 547.
2. N.P.Ong, Lu Li, G.Josep, J.G.Checkelsky, R.J.Cava, Affiliation: *Dept of Physics, [Link to Ong Lab -->] Physics.com* (2008).
3. I.Kerner, *Moldavian Journal of the Physical Sciences,* **4** №3 (2005) 318.
4. G.N.Kozhemyaki, M.A.Nalivkin, M.A.Rom, P.V.Mateychenko, *J. Cryst. Growth*,. **263** № 4 (2004) 148.

5. Д.Ш.Абдинов, Т.Д.Алиева, Н.М.Ахундова, М.М.Тагиев, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXIII** №5 (I) (2003) 41.
6. Б.А.Таиров. О.И.Ибрагимова, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXIX** №2 (2009) 86.
7. Б.А.Таиров, *Дисперсия электромагнитных магнетоплазменных волн и гальваномагнитные эффекты в сплавах $Bi_{1-x}Sb_x$. Дисс. на звание доктора физ.-мат. Наук, Баку*, (1994).
8. Д.В.Гицу, Г.А.Иванов., В.И.Веракса, Б.П.Королевский, А.С.Федорко, *Неорганические материалы*, **7** (1971) 1003.
9. П.П.Бодюл., В.У.Гарбажиу, *Особенности действия примесей в висмуте. Полуметаллы и узкозонные полупроводники под влиянием воздействий, Кишинев*, (1983) 26.
10. Б.А.Таиров, *Известия АН Азерб. ССР*, *8* №2 (1987) 93.
11. L.W.Aukerman, R.K.Willardson*, J. of Appl. Phys.,* **31** (1960) 939.
12. G.E. Smit, *Phys. Rev. Letters,* **9** (1962) 487.
13. J. K.Galt, W.A. ager, F.R.Merritt, B.B.Cetlin, A.D.Brailsford, *Phys. Rev.,* **114** (1959) 1396.

Te ILƏ AŞQARLANMIŞ n-$Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ BƏRK MƏHLULLARININ MONOKRISTALLARINDA ELEKTRONLARIN ENERJI SPEKTRI

B.A.TAHIROV, O.I.IBRAHIMOVA, S.Z.DƏMIROVA, T.F.YUSIFOVA

Te ilə 0,01; 0,1; 0,2at.% miqdarında aşqarlanmış n-$Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ bərk məhlullarının monokristal nümunələrində 77-300 K temperatur intervalında xüsusi elektrik müqaviməti (ρ_{ij}), Holl əmsalı ($R_{ijк}$) və maqnit müqaviməti ($\rho_{ij,kl}$) komponentləri tədqiq edilmişdir.

Göstərilmişdir ki, daşınma hadisəsində yüngül və ağır elektronlar iştirak edir, eyni zamanda yüngül və ağır zonalar arasındakı energetic məsafə, həmçinin, yüngül və ağır elektronların effektiv kütlələri nisbəti və yürüklükləri nisbəti təyin edilmişdir.

MANIFESTATION OF LIGHT AND HEAVY ELECTRONS IN THE GALVANOMAGNETIC CHARACTERISTICS OF n-type $Bi_{0.88}$ $Sb_{0.12}$ SINGLE CRYSTALS DOPED BY Te

B.A.TAIROV, O.I.IBRAGIMOVA, S.Z.DAMIROVA, T.F.YUSIFOVA

The components of specific electrical resistance ρij, Hall coefficients Rijк, and magnetoresistance ρij,kl have been measured in n-type $Bi_{0.88}$ $Sb_{0.12}$ single crystals doped by tellurium in the amount of 0,01; 0,1; 0,2 at.% in the temperature range77÷300K. From the experimental data analysis has been determined that light and heavy electrons participate in the transport phenomena, and the energy distance between the light and heavy electron valleys has been deduced to be about 40meV; the heavy- and light electron density-of-state effective mass ratio has been estimated to be $m_2^*/m_1^* = 3$.

Редактор:Г.Аждаров

ВЛИЯНИЕ ВВЕДЕНИЯ Y-Ba-Cu-O ВТСП МАТЕРИАЛА НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ЭТИЛЕНПРОПИЛЕНОВОГО КАУЧУКА

В.М.АЛИЕВ

Институт физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку пр. Г.Джавида, 33

Получен электропроводящий композиционный материал на основе этиленпропиленового каучука (ЭПК) и высокотемпературного сверхпроводника $YBa_2Cu_3O_x$. В состав композита было дополнительно введено непредельное соединение-амид-акриловая кислота (ААК). Определено влияние полярных групп ($-CO-NH_2$) в цепи каучука на его электропроводность. Установлено, что использование ВТСП материала в качестве наполнителя улучшает физико-механические характеристики композитов. Определено, что электропроводность композита характеризуется цепочечным механизмом проводимости.

Электропроводящие полимерные материалы находят всѐ более широкое применение в электротехнике и электронике. В последние годы по технологии производства электропроводящих полимерных композиционных материалов проведены важные научные исследования, результаты которых успешно используются при создании различных узлов приборов и аппаратов электротехники и электроники. Особенностью этого класса материалов является введение проводящего компонента в полимерную основу для создания необходимой электрической проводимости [1-5].

В работах [6-10] представлены результаты исследования и разработки новых технологических приемов, позволяющих при данном содержании проводящего наполнителя увеличить электропроводность материалов. Новые достижения в области проводящих эластомеров связаны с разработкой метода повышения проводимости, заключающегося в применении смесей некоторых несовместимых полимеров. Также имеются сведения о том, что каучуки, содержащие значительное количество полярных групп в цепи и электропроводящие наполнители, обладают большей электропроводностью по сравнению с другими каучуками [11]. В работах [12,13] ВТСП материалы использованы в качестве проводящего наполнителя в составе различных полимерных композиционных материалов.

Анализ литературных данных показал, что повышение электропроводности полимерных материалов зависит от многих факторов, в том числе, от типа электропроводящих наполнителей, участия в цепи полимера полярных групп, а также совмещения несовместимых полимеров.

Целью настоящей работы является получение и исследование электропроводящих полимерных материалов на основе ЭПК, амид-акриловой кислоты и $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ путем совместного структурирования с помощью перекиси дикумила (ПДК). Проведено изучение влияния введения ВТСП материала на физико-механические и электрические характеристики вулканизатов в широком диапазоне температур, а также выяснение механизма проводимости.

Синтез $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ был проведен по хорошо апробированной методике [14,15] при 1173÷1193К, обогащение кислородом производилось путем отжига в атмосфере кислорода.

Электрические характеристики ВТСП материалов были измерены в интервале 77÷300К четырех-зондовым методом.

Удельное объемное сопротивление ρ_v синтезированных $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ при комнатной температуре составляет $3{,}75.10^{-3}$Ом.см; сверхпроводящий переход наблюдается при 85÷90К. Размер электропроводящих частиц составляет 80÷100мкм.

Модельные смеси на основе ЭПК, ААК, ВТСП материала и вулканизирующего агента (ПДК) изготавливались на лабораторных вальцах и были вулканизованы при 433К под давлением 20МПа в течение 40 мин. Физико-механические свойства композитов определялись по ГОСТу, изложенному в [16]. Объемное сопротивление образцов было измерено по методике [4] с использованием тераомметра.

Состав смесей приведен в Таблице 1. В качестве наполнителей был использован $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ в количестве 60 масс.ч. от каучука (ранее было установлено, что наилучшие физико-механические свойства композитов получаются добавлением до 60 масс.ч. ВТСП материала [17]).

Таблица 1.

Состав смесей композиционных материалов на основе ЭПК, ААК, $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ и ПДК.

№ п/п	№ смеси	1	2	3	4	5	6	7
	Компоненты масс.ч. от 100 масс.ч. каучука							
1	ЭПК	100	100	100	100	100	100	100
2	ВТСП($Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$)	-	-	60	60	60	60	60
3	ААК	-	20	-	10	20	30	40
4	ПДК	3	3	3	3	3	3	3

Методы получения привитых сополимеров в процессе вулканизации путем полимеризации непредельных соединений (в частности ААК), введенных в состав полимеров, представлены в [18-20]. Этот метод был использован нами для получения композиционных электропроводящих полимерных материалов ЭПК, ААК, $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ и ПДК. При этом в результате полимеризации ААК (под действием ПДК) был получен привитый сополимер ЭПК с ААК и гомополимер-полиакриламида. При этом ожидалось, что полярные амидные группы ($-CONH_2$) в цепи каучука будут положительно влиять на проводимость. Было установлено, что 88÷90% введенного амида присоединяется к каучуку, а остальная часть определяется в виде гомополимера (8%) и непрореагировавшего мономера (2÷3%) [18]. Отметим, что при введении в состав композита до 60 масс.ч. ВТСП материала содержание привитого полиакриламида уменьшается до 60÷70% и содержание гомополимера увеличивается до 20÷25%. При этом количество непрореагировавшего мономера остается неизменным. Сополимер ЭПК с ААК был получен в процессе вулканизации в присутствии $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ в качестве наполнителя и сшивающего агента ПДК. Для определения количества привитого сополимера ЭПК с ААК и гомополимера-полиакриламида полученного в составе композита использованы результаты исследований [18].

Результаты исследования введения ААК и ВТСП материалов на физико-механические свойства композитов представлены в Таблице 2. Как видно, прочностные свойства композитов возрастают при введение до10 масс.ч. ААК. Дальнейшее повышение содержания ААК в составе композита приводит к некоторому ухудшению физико-механических свойств электропроводящего материала.

Измерения удельного объемного сопротивления ρ_v полученных вулканизатов при комнатной температуре (Таблица 2) показывают, что, несмотря на ухудшение физико-механических свойств композиционных материалов с увеличением содержания ААК в системе, удельное электрическое сопротивление

материалов уменьшается. На наш взгляд, это указывает на участие амидных групп в цепи каучука в электропроводности композиционных материалов.

Таблица 2.

Физико-механические и электрические свойства композиционных материалов.

Свойства композитов	1	2	3	4	5	6	7
Напряжение при 300% удлинении, МПа	-	-	0,8	1,5	2,0	1,85	1,8
Сопротивление разрыву, МПа	1,06	1,54	1,3	3,4	2,75	2,5	2,4
Относительное удлинение,%	300	350	420	550	550	450	425
Остаточное удлинение, %	6	8	5	25	25	27	27
Удельное электрическое сопротивление, Ом.м	$6{,}4x10^6$	$1{,}78x10^6$	$1.6x10^5$	$4.25x10^5$	$1.1x10^5$	10^5	$7.9x10^4$

Для подтверждения вышесказанного, было исследовано влияние ААК на электропроводность в широком диапазоне температур. На Рис.1 представлены температурные зависимости удельного объемного сопротивления композитов на основе чистого каучука (1), содержащие в своѐм составе 20 масс.ч. ААК (2) и содержащие в своим составе ВТСП материал (3). Как видно, с повышением температуры наблюдается уменьшение ρ_v всех испытанных образцов. Снижение ρ_v композита, содержащего в своим составе до 20 масс.ч. ААК по сравнению с композитом чистого каучука по всем исследованном интервале температур подтверждает участие полярных-$CONH_2$ групп в цепи каучука в электропроводности.

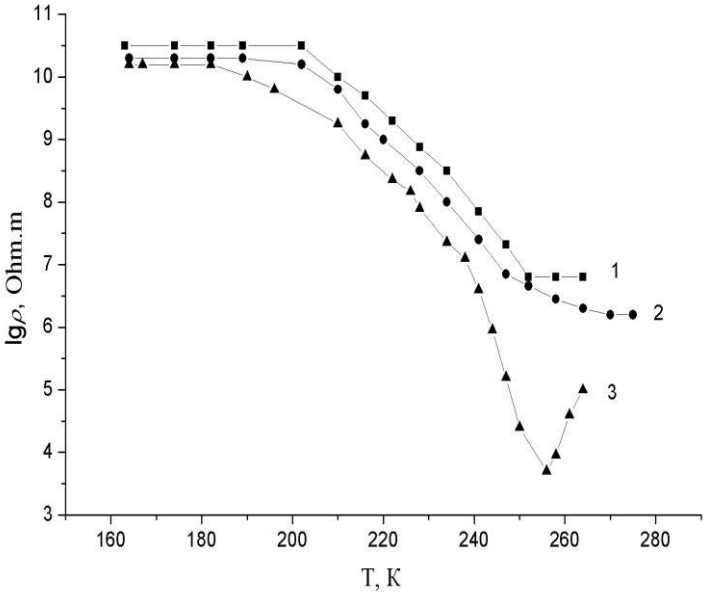


Рис.1.

Температурная зависимость удельного сопротивления композита на основе ЭПК от содержания ААК: 1-0; 2-20 масс.ч.; 3-0 (смесь содержит 60 масс.ч. $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$).

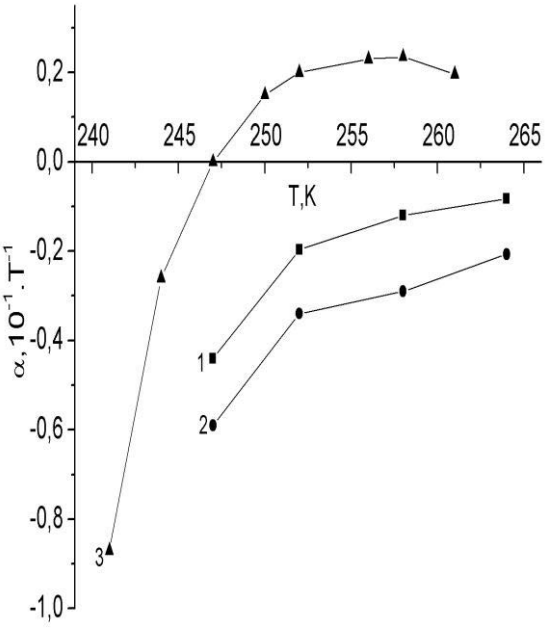


Рис.2.

Влияние температуры на температурный коэффициент сопротивление композитов 1-3.

Отметим, что композиты чистого каучука и содержащие ААК, судя по $\rho_v(T)$ являются диэлектриком. Уменьшение удельного сопротивления в обоих композитах в интервале 210÷260К связано с тем, что вблизи температуры стеклования композитов повышается подвижность макромолекул и это приводит к

активации дополнительных носителей зарядов (ионов, неизрасходованных вулканизующих агентов, остатков мономеров и т.д.) под действием электрического поля.

На Рис.1(3) представлена также температурная зависимость удельного сопротивления композита с $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$. Как видно, участие в составе композита ВТСП материала значительно повышает проводимость в широком интервале температур по сравнению с чистым композитом, а также с композитом, содержащем ААК.

Этот факт объясняется тем, что при изменении объема композита при нагревании благодаря различию величине линейного коэффициента расширения каучуковой фазы и фазы электропроводящего наполнителя вблизи температуры стеклования каучука контакты частиц наполнителей улучшается. Это приводит к уменьшению объемного сопротивления композита [10].

Для диэлектрических материалов характерен отрицательный температурный коэффициент сопротивления, а в проводящем композиционном материале температурный коэффициент сопротивления может быть как положительным, так и отрицательным [5].

Проведено исследование температурного коэффициента сопротивления α образцов 1-3 (Таблица 1). Значение α определяется путем измерения удельного сопротивления при различных температурах с последующим вычислением по формуле [5]

$$\alpha = \Delta\rho_v/\rho_v.\Delta T, \qquad (1)$$

где ρ_v-удельное сопротивление электропроводящего материала, измеренное при комнатной температуре, $\Delta\rho_v$-изменение удельного объемного сопротивления, ΔT-рассматриваемый диапазон температур.

На Рис.2 представлена зависимость α от температуры композитов 1-3. Как видно, образцы 1 и 2 имеют отрицательный α, а температурный коэффициента сопротивления композита, наполненного ВТСП материалом (3), меняет знак с отрицательного на положительный. Это подтверждает вывод о том, что введение в состав композитов ВТСП материала ($Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$) придает ему электропроводящие характеристики.

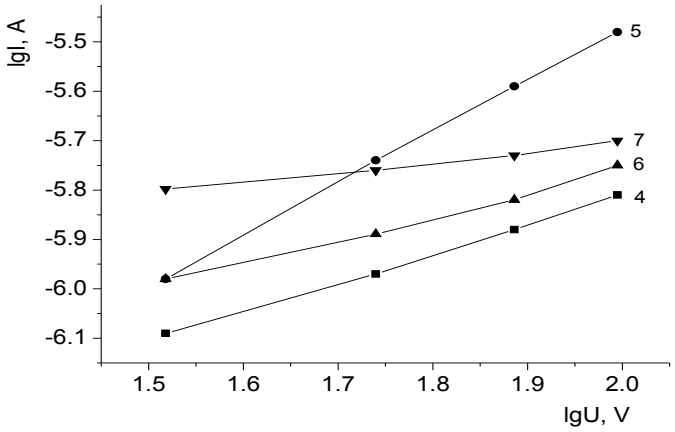


Рис.3.

Вольт-амперная характеристика композита на основе ЭПК в зависимости от содержания ААК: 4-10 масс.ч.; 5-20 масс.ч.; 6-30 масс.ч.; 7-40 масс.ч.

Механизм проводимости полимерных композиционных материалов исследован в работах [21,22]. Электропроводящие полимерные материалы характеризуются, в основном, цепочечным механизмом проводимости, который обусловливает высокую степень наполнения. Оценка преобладающего типа

контакта производилась по характеру зависимости силы тока через образец от напряжения. Линейность или слабое отклонение от линейности этой зависимости, в соответствии с законом Ома, указывает на существенное преобладание непосредственных контактов между частицами наполнителей в структуре. Резкое отклонение от линейной зависимости указывает на существование второго неомического механизма проводимости, обусловленного наличием слоев диэлектрика на пути электрического тока.

На Рис.3 представлены вольт-амперные характеристики исследованных образцов 4-7. Анализ] вольт-амперных характеристик композитов, проведенный по методике [21,22], показывает, что зависимость силы тока от напряжения удовлетворяет уравнению $I=cU^n$ (где I-сила тока в амперах, U-напряжение в вольтах, а *c* и *n*-постоянные). Это подтверждает, что проводимость материала осуществляется непосредственно в результате контакта частиц наполнителей.

1. Л.Ф.Валиулин, Р.Я.Дебердеев, *5-ая конференция по интенсификации нефтехимических процессов «Нефтехимия -99», тезисы докладов*, **1** (1999) 146.
2. N.C.Das, T.K.Chaki, D.Khastyir, A.Chakraborty, *Polym. Technol.,* **20** №3 (2001) 226.
3. Н.Н.Коморова, А.И.Прохоров, А.В.Полубояринов, *Исследование проводимости наполненных полимеров, Сб. научн. трудов. М., Изд-во МИФИ*, (2005) 123.
4. В.Е.Гуль, Л.З.Шенфиль, *Электропроводящие полимерные композиции. М. Химия,* (1984) 240.
5. В.С.Криков, Л.А.Колмакова, *Электропроводящие полимерные материалы. М. Энергоатомиздат,* (1984) 176.
6. М.А.Магрунов, А.М.Берлянд, К.Ш.Саидходжаева, *Узб. хим. ж.,* 5 (1979) 26.
7. В.Е.Гуль, В.П.Соколова, Г.А.Клейн, С.З.Бондаренко, Э.А.Арипов, А.М.Берлянд, *Пласт. массы*, **10** (1972) 47.
8. М.А.Магрупов, Б.Д.Юсупов, М.К.Ахраров, И.Гафуров, У.Абдурахманов, *Высокомолек. соед*., А, **18** (1976) 2203.
9. А.Д.Хасхачих, Т.А.Чавчич, *Каучук и резина,* **9** (1972) 22.
10. А.А.Блинов, В.С.Журавлев, А.Е.Корнев, *Каучук и резина,* 10 (1975) 27.
11. Ф.Ф.Кошелев, А.Е.Корнев, Н.С.Климов, *Общая технология резины, М., Химия*, (1968) 560.
12. N.Dishovsky, F.El-Tantany, R.Dimitrov, *Polymer Test*., **23** №1 (2004) 69.
13. Е.Назарова, П.Дочев, Е.Влахов, Б.Терзийска, В.Ковачев, Е.Денев, К.Димов, СФХТ, **4** (1991) 6.
14. С.А.Алиев, В.М.Алиев, Дж.А. Багиров, И.А.Исмаилов, А.Ш. Мехтиев, С.С.Рагимов, А.В.Эйнуллаев, *Электрические термоэлектрические свойства высотемпературных сверхпроводников* $Y_{1-x}Tm_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, $Y_{1-x}Nd_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, *Припринт 348, Инст. Физики АН Азербайджана, Баку*, (1990).
15. В.М.Алиев, С.А.Алиев, Дж.А.Багиров, И.А.Исмаилов, А.Ш.Мехтиев, С.С.Рагимов, А.В.Эйнуллаев, *Известия АН Азербайджана, сер. Физ-тех. и мат. наук*, **3-4** (1993) 103.
16. Л.А.Бергштейн, *Лабораторный практикум по технологии резины, Л. Химия*, (1989).
17. В.М.Алиев, Я.М.Билалов, Дж.А.Рагимов, *J. Fizika*, **13** №1-2, (2007) 205.
18. А.А.Донцов, А.А.Канаузова, Г.М.Саськова, Б.А.Догадкин, *Высокомолек. соедн.*, **A16** (1974) 217.

19. В.Ф.Солдатов, А.А.Донцов, Т.Г.Казаринская, Б.А.Догадкин, *Высокомолек. соедн.,* **A15** (1973) 2075.
20. А.А.Донцов, А.А.Канаузова, Г.М.Саськова, Б.А.Догадкин, Высокомолек. соедн., **A16** (1974) 217.
21. К.Печковская, Ц.Мильман, Б.Догадкин, *Коллоидн. ж.,* **14** (1952) 250.
22. Ф.Ф.Кошелев, Е.М.Спридонова, *Изв. Вузов. Сер. Химия и химическая технология,* **2** (1959) 263.

ETİLENPROPİLEN KAUÇUKU ƏSASINDA HAZIRLANMIŞ KOMPOZİTLƏRİN FİZİKİ-MEXANİKİ VƏ ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİNƏ Y-Ba-Cu-O YTİ MATERİALININ TƏSİRİ

V.M.ƏLIYEV

Etilenpropilen kauçuku (EPK) və yüksəktemperaturlu ifratkeçirici (YTİ) $Y_1Ba_2Cu_3O_{7-\delta}$ əsasında elektrik keçiriciliyinə malik kompozit materiallar alınmışdır. Kompozit materialların tərkibinə əlavə olaraq doymamış birləşmə-akril turşusunun amidi daxil edilmişdir. Kauçuk zəncirində alınan $–CO-NH_2$ polyar qrupun eiektrik keçiriciliyinə təsiri öyrənilmişdir. Təsdiq edilmişdir ki, YTİ materialı doldurucu kimi istifadə olunduqta alınmış kompozit materialların fiziki-mexaniki xassələri yaxşılaşır. Təyin edilmişdir ki, kompozit materialların elektrik keçiriciliyi zəncirvari mexanizmlə xarakterizə olunur.

THE AFFECT OF THE Y-Ba-Cu-O HTSC MATERIALS INTRODUCTION IN EPC-BASED COMPOSITION ON ITS PHYSICAL-MECHANICAL AND ELECTROPHYSIKAL PROPERTIES

V.M.ALIEV

The electro conducting composition based on the ethylenypropileny caoutchouc and the $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ –HTSC has been received. The off-peak compound (amides acrilate acid) has been introduced in this composition additionally. The influence of polar group ($-CO-NH_2$) in a caoutchouc chained on its electroconductivity has been obtained. It has been established the use of HTSC material by stuff has been improved the physical- mechanical characteristics of composition. The electro conductivity of composition has been characterized by a chain-mechanism of conductivity.

Редактор: Ш.Гасанлы

ZPR-3-59 REAKTORUN ÜÇÜN GECIKƏN NEYTRONLARIN EFFEKTIV PAYININ VƏ ANI NEYTRONLARIN YAŞAMA MÜDDƏTININ HESABLANMASI

R.N.MEHDIYEVA[1], L.Ə.TAYIBOV[1,2]

Azərbaycan MEA Radiyasiya Problemləri İnistitutu[1]
AZ-1143, Bakı ş., F.Agayev 9
Birləşmiş Nüvə Tədqiqatları İnistitutu[2]
Dubna-141980, Dubna ş, Jolio-Küri 6

Təqdim olunmuş işdə DORT və SCALE programları vasitəsilə gecikən neytronların effektiv payı və ani neytronların yaşama müddəti hesablanmış və hesablama zamanı məlum olmuşdur ki, bu parametrlərin hesablanmış qiymətləri gecikən neytronların hesablama zamanı istifadə olunan parametrlərinin seçilməsindən asılıdır.Hesablama zamanı gecikən neytronların effektiv payı üçün 230pcm ani neytronların yaşama müddeti üçün ise 0,92 ns qiyməti alınmışdır. Bu qiymətlər həmin kəmiyyətlər üçün təcrübədən alınan qiymətlərdən 1% fərqlənir.

Gecikən neytronların reaktor dinamikasına təsiri onların reaktorun gücünün idarə olunmasına təsirinə ekvivalentdir. Gecikən neytronların ümumi bölünmə neytronlarının cüzi bir hissəsini təşkil etməsinə baxmayaraq nüvə reaksiyalarının idarə olunmasında çox böyük əhəmiyyətə malikdir. Əgər zəncirvari reaksiyanın gedişində yalnız ani neytronlar iştirak etmiş olsaydı reaktor gücünü idarə etmək mümkünsüz olardı. Reaktorun kinetik parametrləri olan gecikən neytronların effektiv payı və ani neytronların yaşama müddətini təcrübədən bilavasitə ölçmək mümkün deyildir. Təcrübədə yalnız bu iki kəmiyyətin nisbətini ölçmək mümkündür ki, məhz bu səbəbdəndə bu kəmiyyətlərin hesablanması reaktor dinamikasında çox böyük əhəmiyyətə malikdir. Bu isə hesablama zamanı istifadə olunan gecikən neytronların parametrlərindən və hesablama metodundan asılıdır. Adətən gecikən neytronların effektiv payı həmin neytronların effektiv çıxışının ani neytronların effektiv çıxışına olan nisbəti şəklində təyin olunur.Bunu nəzərə alsaq aşagıdakı ifadəni yaza bilərik[1].

$$\beta_{eff} = \frac{\sum_i \sum_m \int \psi \chi_{di}^m \nu_{di}^m \Sigma_f^m \phi' d\Omega' dE' d\Omega dE dr}{\sum_m \int \psi \chi_{di}^m \nu_{di}^m \Sigma_f^m \phi' d\Omega' dE' d\Omega dE dr} \qquad (1)$$

Harada ki, Ω, E və $r-$neytronun hərəkət istiqaməti, enerji və neytronun malik oldugu kordinat,
m-izotopun nömrəsi,
$\phi' = \phi'(r,\Omega',E')$ –vektorial sel,
$\psi = \psi(r,\Omega,E)$ – vektorial effektiv sel,
$\Sigma_t^m = \Sigma_t^m(r,E')$ – makroskopik effektiv kəsik,
$\nu_t^m = \nu_t^m(r,E')$ –bir bölünmədən yaranan ümumi neytronların sayı,
$\nu_{di}^m = \nu_{di}^m(r,E')$ –bir bölünmədən alınan i-ci qrup gecikən neytronlrın orta sayı,
$\chi_{di}^m = \chi_{di}^m(r,E)$ – gecikən neytronların spektri,
$\chi_t^m = \chi_t^m(r,E)$ – bölünmədən alınan bütün neytronların spektridir.

Məlum oldugu kimi bir bölünmədən alınan i-ci qrup neytronların sayı ilə onların nisbi çıxışı arasında aşagıdakı münasibət vardır. $\nu_{di}^m = a_i^m \nu_d^m$ Harada ki, a_i^m-i-ci qrup gecikən neytronların payı aşagıdakı ifadədən təyin olunur.

$$\beta_{oi}^m = \frac{\nu_{di}^m}{\nu_t^m} = \frac{a_i^m \nu_d^m}{\nu_t^m} \qquad (2)$$

(2)-ni (1)-də nəzərə alsaq onda gecikən neytronların effektiv payı ücün aşagıdakı ifadəni alarıq[2].

$$\beta_{eff} = \frac{\sum_i \sum_m \int \psi \chi_{di}^m \beta_{oi}^m \nu_t^m \Sigma_f^m \phi' d\Omega' dE' d\Omega dE dr}{\sum_m \int \psi \chi_t^m \nu_t^m \Sigma_f^m \phi' d\Omega' dE' d\Omega dE dr} \quad (3)$$

harada ki, χ_t^m – bölünmədən alınan bütün neytronların spektri olub aşagıdakı şəkildə təyin olunur

$$\chi_t^m = (1 - \sum_i \beta_{oi}^m)\chi_p^m + \sum_i \beta_{oi}^m \chi_{di}^m \quad (4)$$

Həmçinin gecikən neytronların effektiv payının effektivlik əmsalı ilə əlaqəsindən də istifadə etmək olar. Effektivlik əmsalının gecikən və ani neytronların spektrləri arasındakı fərqin ölçüsü oldugunu nəzərə alsaq bu neytronların effektiv payının effektivlik əmsalı ilə əlaqəsini aşagıdakı şəkildə yaza bilərik[3].

$$\beta_{eff} = \sum_i \gamma_i \beta_{oi} \quad (5)$$

Harada ki, β_{oi} – i-ci qrup gecikən neytronların sayı olub aşagıdakı ifadədən təyin olunur

$$\beta_{oi} = \frac{\sum_m \int \psi \chi_{di}^m \beta_{oi}^m \nu_t^m \Sigma_f'^m \phi' d\Omega' dE' d\Omega dE dr}{\sum_m \int \psi \chi_{di}^m \nu_t^m \Sigma_f'^m \phi' d\Omega' dE' d\Omega dE dr} \quad (6)$$

i –ci gecikən neytronlar grupu üçün effektivlik əmsalını isə aşagıdakı ifadədən təyin edə bilərik

$$\gamma_i = \frac{\sum_m \int \psi \chi_{di}^m \nu_t^m \Sigma_f^m \phi' d\Omega' dE' d\Omega dE dr}{\sum_m \int \psi \chi_t^m \nu_t^m \Sigma_f^m \phi' d\Omega' dE' d\Omega dE dr} \quad (7)$$

(7) ifadəsinin sürət və məxrəci eyni bir spektrə malikdir çünki i-ci qrup gecikən neytronların payı həmin neytronlrın sayının bir bölünmədən alınan gecikən neytronların sayına olan nisbətinə bərabərdir.Bir bölünmədən alınan ümumi gecikən neytronların payı i-ci qrup gecikən neytronların cəminə bərabər oldugundan gecikən neytronların payı üçün aşagıdakı ifadəni yaza bilərik

$$\beta_o = \sum_i \beta_{oi} \quad (8)$$

İkinci mühüm parametr isə neytronun generasiya müddətidir ki, o da ani neytronların yaşama müddəti ilə aşagıdakı şəkildə əlaqəlidir.[4]

$$\Lambda = \frac{l}{k} \quad (9)$$

Əgər k=1 olarsa generasiya müddəti ani neytronların yaşama müddətinə bərabərdir.Gecikən neytronların effektiv payına analoji olaraq ani neytronların yaşama müddəti üçün aşagıdakı ifadəni yaza bilərik.[5]

$$\Lambda = \frac{\int \phi^+(r,E,\Omega)\frac{1}{\upsilon}\phi(r,E,\Omega)dEd\Omega dr}{\int \phi^+(r,E,\Omega)\chi(E)\nu(E)\Sigma_f(r,E)\phi(r,E,\Omega)dEd\Omega dr}$$

Harada ki, υ-neytronun sürəti olub aşagıdakı ifadədən təyin olunur $\upsilon = \sqrt{\frac{2E_k}{m}}$.

ZPR-3-59 yıgını Pu^{239}-yanacaglı və qurguşun əksetdiricili olub aktiv zonasında 80kq-a yaxın bölünmə materialı olmaqla aktiv zonası silindirik quruluşa malikdir və radiusu 22sm-ə bərabərdir[6]. Aşagıdakı cədvəldə aktiv zonaya daxil olan bütün materiallar və onların aktiv zonadakı sıxlıgı və eləcədə aktiv zonanın radial və aksial istiqamətdəki ölçüləri verilmişdir.

Cədvəl1.

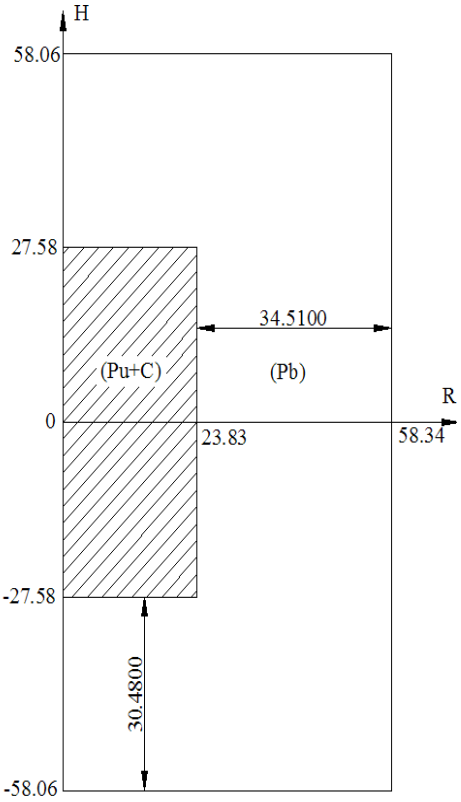
(Sıxlıq- 10^{-21} at/sm^3).

Izotoplar	Aktiv zona (76,09kg Pu^{239}+Pu^{241})	Aksial əksetdirici	Radial əketdirici
Pu^{239}	2.1030		
Pu^{240}	0.1003		
Pu^{241}	0.0056		
Al	0.217		
C	59.02		
Fe	7.717	5.593	4.540
Cr	1.919	1.391	1.129
Ni	0.875	0.609	0.494
Mn	0.0801	0.0581	0.0471
Si	0.0941	0.0682	0.0553
Pb		28.16	28.24
Radius (Aktiv zona sm)	23.83		58.34
Hündürlük (Aktiv zona sm)	55.16		
Aksial əksetdirici qalınlıgı (sm)		30.48	

Reaktor parametrlərinin hesablanması zamanı əvvəlcədən aktiv zonaya daxil olan materiallar və eləcədə aktiv zonanın ölçülərinə əsasən onun həndəsi modelinin qurulması zəruri şərtlərdən biridir.Bunu nəzərə alsaq cədvəldə verilənlərə əsasən ZPR-yıgını üçün aşagıdakı şəkildə həndəsi model təsvir etmək olar.

Hesablama məhz bu həndəsi model əsasında Scale və Dort proqramları vasitəsilə yerinə yetirilmişdir. Scale proqramı birölçülü Dort proqramı isə ikiölçülü istiqamətdə reaktor parametrlərini hesablamaga imkan verir. Hesablama zamanı 16-enerji qrupundan istifadə olunmuşdur ki, uygun qrup parametrləri Scale proqramında tapılmışdır. İstifadə olunan gecikən neytronların parametrləri aşagıdakı cədvəldə verilmişdir.

Scale proqramı vasitəsi ilə tapılan qrup parametrlərindən istifadə olunaraq Dort proqramı vasitəsi ilə çoxalma əmsalları, sel və effektiv sel hesablanaraq (3) və (10) ifadələri əsasında Fortran proqramlaşdırma dilində yazılmış poqram əsasında gecikən neytronların effektiv payı və ani neytronların yaşama müddəti hesablanmışdır. Bu parametrlər üçün tapılmış qiymətlər uygun olaraq 230pcm və 0,92ns yə bərabər olmuşdur ki, bunlar da təcrübədən alınmış qiymətlərdən cəmi 1% fərq lənmişdir.



Şəkil 1.
ZPR yıgını üçün həndəsi model

Cədvəl 2.

	1	2	3	4	5	6	7	9	Yekun
1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.027	0.012	0.005
2	0.000	0.013	0.004	0.014	0.048	0.047	0.084	0.057	0.042
3	0.008	0.187	0.021	0.065	0.126	0.107	0.098	0.102	0.107
4	0.120	0.516	0.235	0.392	0.360	0.334	0.327	0.317	0.356
5	0.602	0.253	0.510	0.418	0.376	0.409	0.351	0.399	0.385
6	0.238	0.031	0.190	0.096	0.078	0.093	0.091	0.102	0.091
7	0.030	0.001	0.032	0.013	0.010	0.008	0.020	0.011	0.012
8	0.001	0.000	0.006	0.002	0.001	0.001	0.001	0.000	0.001
9	0.000	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
10	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
11	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
12	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
13	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
14	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
15	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
16	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
sum	0.999	1.001	0.999	1.000	0.999	1.001	0.999	1.000	0.999
keV	211	613	282	436	532	505	668	560	523

1. D.Gregory Spriggs, Robert D. Busch, Joann M. Campbell, *Annals of Nuclear Energy,* **28** (2001) 477.
2. Svetozar Michalek, Jan Hascik, Gabriel Farkas, *Journal of Electrical Engineering,* **59** №4 (2008) 221.
3. М.Н.Зизин, *Расчет нейтронно-физических характеристик реакторов на быстрых нейтронах. М., Атомиздат*, (1978).
4. Luka Snoj, Andrej Kavcic, Gasper Zerovnik, Matjaz Ravnik, *Annals of Nuclear Energy*, **37** (2010) 223.
5. G.R.Keepin, *Physics of Nuclear Kinetics. Addision-Wesley Publishing Company, Inc.,Reading.,* (1965) 161.
6. S.G.Garpenter, J.M.Gasidlo, J.M.Stevenson, *Nuclear Science Engeenering,* **2** (1972) 236.

CALCULATION OF THE EFFECTIVE FRACTION OF MISSING NEUTRONS AND THE LIFE-TIME OF INCIDENT NEUTRONS FOR ZPR-359 (ZERO POWER REACTOR) COMPOSITION

R.N.MEXTIEVA, L.A.TAIBOV

In this work have calculated effective delayed neutron fraction and prompt neutron lifetime by DORT and SCALE programs and it has been determined by the calculation that the calculated value of these parameters depends on selection of the parameters used in calculation of the delayed neutrons. Effective delayed neutron fraction has been equal 230pcm and prompt neutron lifetime 0.92ns.These values are 1% different than the values obtained the practice for the mentioned quantities

РАССЧЕТЫ ЭФФЕКТИВНОЙ ДОЛИ ТОРМОЗНЫХ НЕЙТРОНОВ И ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ МГНОВЕННЫХ НЕЙТРОНОВ ДЛЯ РЕАКТОРА ZPR-359

Р.Н.МЕХТИЕВА, Л.А.ТАИБОВ

В данной работе представлены рассчеты эффективной доли тормозных нейтронов и времени жизни мгновенных нейтронов. Было выявлено, что полученные значение для тормозных нейтронов зависят от выбранных параметров. Рассчитано, что полученные значения эффективной доли для тормозных нейтронов равны 230pcm, а значение времени жизни мгновенных нейтронов 0,92ns. Разница между рассчитанными значениями и значениями, полученными экспериментальным путем составляет 1%.

Редактор: О.Абдинов

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА InP<Sn> ПОДВЕРГНУТЫХ γ-ОБЛУЧЕНИЮ

Ш.Ш.РАШИДОВА

Институт Физики АН Азербайджана
AZ1143, Баку, пр. Г.Джавида, 33

Исследованы спектры поглощения монокристаллов InP<Sn> , облученных гамма квантами с дозами 10 и 35кГр. Показано, что облучение гамма квантами приводит к образованию глубокого уровня E_2=0.2эВ, что связано с комплексом пары $V_{In}In_P$.

Известно, что высокоэнергетическое радиационное воздействие приводит к изменению оптических и структурных свойств полупроводников, что широко используется для модифицирования параметров материалов и приборов на их основе. С помощью высокоэнергетического облучения можно в широких пределах менять физические свойства полупроводника.

Наличие энергетической щели (запрещенной зоны) в электронном энергетическом спектре полупроводника обусловливает его высокую чувствительность к присутствию в кристаллической решетке собственных структурных дефектов: точечных, линейных, объемных.

Изменение подсистемы дефектов под воздействием радиации вызывает изменение спектра локализованных состояний, связанных с дефектами, что приводит к изменению свойства материала.

Применение методов радиотермолюминесценции (РТЛ) и ИК-спектроскопия открывает новые возможности для определения радиационных дефектов антиструктурного типа кристаллов InP, легированных различными примесями и их аналогов.

В настоящей работе представлены экспериментальные результаты исследований антиструктурных дефектов в кристаллах InP, легированного оловом и облученного гамма-квантами. В работе использованы выращенные методом Чохральского образцы, легированные оловом. Образцы представляли собой пластинки размером 20x1,2 мм^2 и толщиной 350мкм.

С целью исключения примесных загрязнений пластинки обрабатывали этиловым спиртом и высушивали при комнатной температуре в среде аргона. Затем для полной очистки от органических загрязнений и дегидрооксилирования поверхности образцы помещали в кварцевые ячейки и дополнительно вакуумировали при давлении P=10^{-5}Па в течение 6 часов по методике [2]

Образцы облучали гамма квантами на изотопном источнике Co^{60} при мощности дозы 1,03Гр/с при температуре жидкого азота (77К). Дозиметрию проводили ферросульфатным методом, а поглощенную дозу ($Д_\gamma$) рассчитывали с учетом электронных плотностей исследуемой системы и дозиметрического раствора. Поглощенная доза составляла 10 и 35кГр.

Кривые радиотермолюминесценции получали на термолюминографе ТЛГ-69М диапазоне температур 80÷450К при скорости разогрева образцов 0,08К/с. Энергию активации центров высвечивания рассчитывали из выражения

$$Ea = \delta \frac{kT_{\max}^{\ 2}}{\Delta T_{1/2}},$$

где к- постоянная Больцмана, $T_{мах}$- абсолютная температура в максимуме пика, $\Delta T_{1/2}$ -полуширина пика на половине высоты, δ-множитель, который в зависимости от типа процесса термолюминесценции составляет 1÷3. [3]

ИК спектры пропускания измерялись на спектрофотометре Specord 71-IR(Carl Zeiss) в области частот 4600÷650см$^{-1}$ при комнатной температуре с помощью специально разработанной ячейки с окнами из CaF_2.
Коэффициенты поглощения вычислялись по формуле [3]

$$t = \frac{(1-R)^2 e^{-\alpha d}}{1-R^2 e^{-2\alpha d}}, \qquad (1)$$

где t - пропускание, d - толщина образца, R - коэффициент отражения.

На Рис.1 показана зависимость коэффициента поглощения от энергии фотона $\alpha(h\nu)$ при различных дозах облучения.

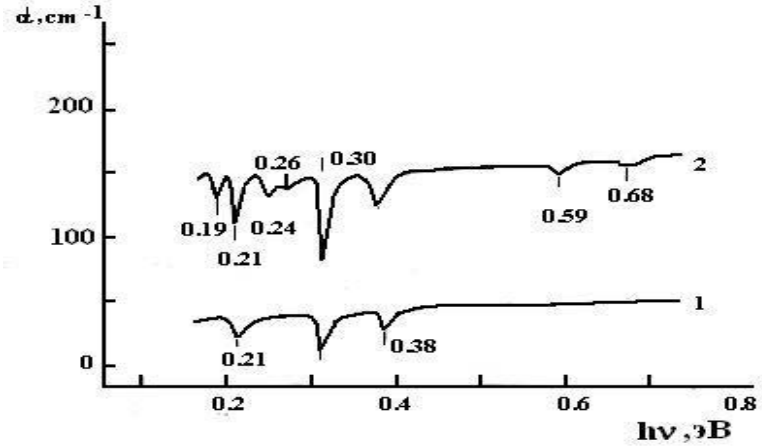


Рис.1.
Зависимость коэффициента поглощения от энергии фотона в кристаллах InP<Sn> при дозах 1-10кГр, 2-35 кГр.

Как видно из рисунка (кривая 1), при сравнительно малых дозах облучения Д=10кГр, наблюдаются полосы поглощения, соответствующие трем электронным ловушкам энергиями 0,21, 0,30 и 0,38эВ. С увеличением дозы облучения от 10 до 35кГр дополнительно появляются полосы поглощения, что свидетельствует об образовании еще пяти электронно-дырочных ловушек. Таким образом, в гамма-облученных кристаллах InP<Sn> обнаруживаются уровни E_1-E_8. Некоторые из этих ловушек были обнаружены авторами работы [1] в эпитаксиальных пленках n-InP методом нестационарной емкостной спектроскопии глубоких уровней, облученных гамма квантами. В отличие от [1] по спектрам ИК-поглощения нами обнаружены еще два уровня с энергией активации E_3=0,24 и E_4=0,26эВ, наличие которых подтверждается методом радиотермолюминесценции [4].

В работе [5] исследованы оптические свойства InP облученного быстрыми интегральными потоками нейтронов и выявлены глубокие уровни, обусловленные фотоионизацией, характерные для неупорядоченных полупроводников с высокой плотностью локализованных состояний в запрещенной зоне. Предполагается, что бомбардировка нейтронами может приводить к формированию в бинарном полупроводнике «раз упорядоченного сплава» как за счет образования дефектов вакансионного типа, так и за счет расслоения материала (образование антиструктурных дефектов). Данные измерений ЭПР в облученном InP подтверждают высокую эффективность формирования как вакансии фосфора V_p, так и антиструктурных дефектов типа P_{In} [6].

Следует отметить, что в работе [7] было теоретически предсказано существование уровня с энергией активации 0,2эВ, соответствующей паре ($V_{In}In_P$). Однако до настоящих исследований не удалось экспериментально обнаружить этот уровень (E_2) . Как показывают ИК и РТЛ данные облучения кристаллов InP<Sn>

гамма-квантами приводят к образованию данного уровня, глубина которого с увеличением дозы гамма-облучения увеличивается в четыре раза. Это указывает на увеличение концентрации антиструктурных дефектов типа In_P и комплексов пары ($V_{In}In_P$). При этом сужение полосы поглощения hν=0.20эВ по мере увеличения дозы гамма-облучения связано с однородностью образовавшегося комплекса.

Анализ полученных экспериментальных результатов позволил сделать вывод о том, что образование этих глубоких уровней связано с появлением антиструктурных дефектов и их кластерами.

1. Т.И.Кольченко, З.М.Ломако, С.Е.Мороз, *ФТП*, **21** (1987) 1075.
2. Н.Н.Гаджиева, *Журнал приклд.спектроскопии,* **7** (2005) 440.
3. Ю.И.Уханов,Оптические свойства полупроводников, Наука, М., (1977).
4. М.И.Алиев, Ш.Ш.Рашидова, М.А.Гусейнова, Н.Н.Гаджиева, , *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXVIII** №2 (2008) 49.
5. В.Н.Брудный, Н.Г.Колин, Д.И.Меркурисов, В.А.Новиков, *ФТП*, **39** (2005) 528.
6. H.N.Bardeleben, *Sol.State.Comm.,* **57** (1986) 137.
7. C.W.Myles, O.F.Sankey, *Phys.Rev.B.,* **29** (1983) 6810.

QAMMA KVANTLARLA ŞÜALANDIRILAN QALAYLA LEGIRƏ OLUNMUŞ İnP KRISTALLARININ OPTIC XASSƏLƏRI

Ş.Ş.RƏŞIDOVA

10kGr və 35kGr dozada qamma kvantlarla şüalanmış InP<Sn> monokristalında udulma spektri araşdırılmışdı.Göstərilmişdirki, şüalanma (V_{In} In_p) cütləri kompleksi ilə əlaqədar olan. E_2=0.2eV dərin səviyyə yaratmışdır.

OPTICAL PROPERTIES OF InP DOPED BY TIN SINGLE CRYSTALS IRRADIATED BY QAMMA-QUANTA

Sh.Sh.RASHIDOVA

Absorption spectra of single crystals irradiated by with dozes of 10 and 35 kGr at liquid nitrogen temperature have been investigated. It has been shown that the irradiation leads to formation of deep level with activation energy of E_2=0.2 eV which is connected with complex $V_{In}In_P$.

Редактор: Р.Сардарлы

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОЧИСТКИ ФЕНОЛЬНЫХ СТОЧНЫХ ВОД МЕТОДОМ ОЗОНИРОВАНИЯ

Ф.А.ТЕЙМУРОВА*, А.Я.НАЗАРОВА*, Ф.Ш.ДЖАФАРОВА

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г. Баку, пр. Г.Джавида, 33
*Азербайджанский Научно-исследовательский и проектный институт газа**
AZ 1123, г. Баку, ул. Ю.Сафарова, 23

Исследована очистка сточных вод от фенола методом озонирования. Установлено, что для полной очистки фенольных сточных вод необходимо введение примерно в семь раз больше озона по весовому количеству по отношению к фенолу.

В последние годы проблема охраны водных ресурсов страны стоит особенно остро. В связи с этим большое народно-хозяйственное значение придается очистке сточных вод промышленных предприятий.

Значительное количество сточных вод, загрязненных различными отходами, образуется на предприятиях химической, нефтяной, газовой и ряда других отраслей промышленности. Одним из главных загрязняющих компонентов сточной воды является фенол. Фенолы, содержащиеся в водоеме, даже в небольших концентрациях, уничтожают его микрофлору и фауну, так как на окисление фенолов расходуется кислород, что приводит к нарушению кислородного режима водоема.

Анализ отечественной и зарубежной научно-технической литературы показывает, что промышленные фенольные сточные воды подвергаются очистке химическими, физико-химическими и биохимическими методами до необходимого качества, зависящего от вида производства [1]. Указанные методы очистки подразделяются на рекуперационные и деструктивные. Рекуперационные методы предусматривают извлечение из сточных вод и дальнейшее использование ценных фенолов. В деструктивных методах фенолы, загрязняющие воды, подвергаются разрушению путем окисления, и продукты разрушения удаляются из воды в виде газов для осадков. Деструктивные методы применяют в случае невозможности или экономической нецелесообразности извлечения фенолов из сточных вод.

В настоящее время выполнено большое число работ по выяснению эффективности и экономичности очистки сточных вод методом озонирования. Исследования, проведенные в странах СНГ и за рубежом, показали, что метод озонирования является эффективным для очистки сточных вод различных производств, загрязненных фенолами и рядом других вредных органических примесей [2,3,4].

Исходя из вышеизложенного, нами проведены исследования по очистке сточных вод от растворенных органических примесей, в частности, от фенолов, методом окисления озоном.

Исследования по очистке и обезвреживанию фенольных сточных вод методом озонирования были проведены на лабораторной установке, схема которой представлена на Рис.1. Согласно схеме, установка состоит из следующих элементов: осушитель воздуха - 1, расходомер - 2, озонатор - 3, высоковольтный трансформатор НОМ-10 – 5, автотрансформатор – 6, миллиамперметр – 7, киловольтметр -8, барботажный абсорбер -4. Основными аппаратами установки являются озонатор и барботажный абсорбер.

Озон получается электросинтезом, под действием электрического разряда на осушенный от влаги воздух в узком газовом пространстве между двумя электродами озонатора. В барботажном абсорбере, содержащем сточную воду с

различной концентрацией фенола, происходит процесс барботирования озоно-воздушной смеси через сточную воду.

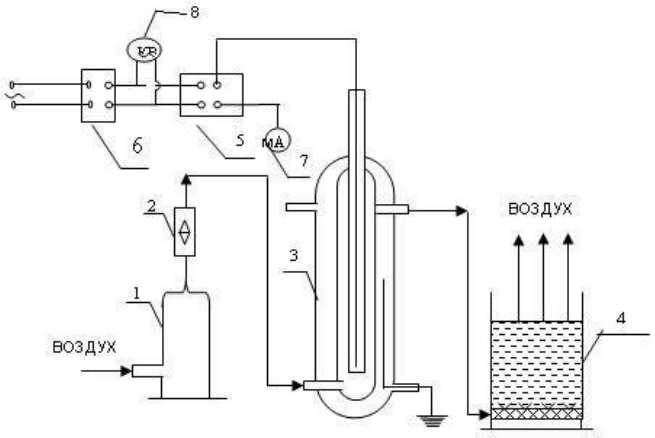


Рис.1

Лабораторная установка по очистке фенольных сточных вод методом озонирования:
1 – осушитель; 2 – расходомер; 3 – озонатор; 4 – барботажный абсорбер; 5 – высоковольтный трансформатор НОМ-10; 6 – автотрансформатор ЛАТР-9А; 7 – миллиамперметр; 8 – киловольтметр.

Определение фенола в фенольной сточной воде до и после ее обработки озоно-воздушной смесью проводили фотометрическим методом.

На лабораторной установке была проведена серия опытов по очистке сточной воды от фенола с концентрацией 0,06мг/л и 2,5мг/л. Опыты проводили при температуре 20÷25°С и подаче воздуха в разрядное пространство озонатора в количестве от 1 до 1,5л/мин. Напряжение переменного тока, прилагаемого к электродам озонатора U=20кВ.

Результаты опытов по очистке фенольных сточных вод озонированием воздухом приведены в Таблицах 1 и 2.

Таблица 1.

Результаты очистки фенольной воды с начальной концентрацией фенола 0,06мг/л.
Расход воздуха в разрядном пространстве 1 л/мин.

Продолжительность очистки, мин.	Расход озона, мг/л	Содержание фенола, мг/л.	Напряжение в озонирующем элементе, кВ
0	0	0,06	20
2	0,25	0,045	20
4	0,38	0,007	20
5	0,45	0,001	20

Как видно из данных Таблицы 1, для окисления фенола от начальной концентрации 0,06мг/л до требований санитарных норм потребовалось введение 0,45мг/л озона при продолжительности очистки 5 мин.

Таблица 2.

Результаты очистки фенольной воды с
начальной концентрацией фенола 2,5 мг/л. Расход воздуха в разрядное пространство 1,5 л/мин.

Продолжительность очистки, мин.	Расход озона, мг/л	Содержание фенола, мг/л.	Напряжение в озонирующем элементе, кВ
0	0	2,5	20
5	8	2,1	20
10	17,5	0,001	20

Согласно данным Таблицы 2, для окисления фенола от начальной концентрации 2,5мг/л до допустимой концентрации по санитарным нормам 0,001 мг/л потребовалось введение 17,5мг/л озона при продолжительности очистки 10мин. При этом больше половины вводимого озона расходуется на окисление содержащихся в сточной воде нефтепродуктов от начальной концентрации 15÷25мг/л до 2мг/л.

Обобщив результаты исследований, можно отметить: методом озонирования возможна очистка вод от фенола; для полной очистки и обезвреживания фенольных сточных вод, содержащих в составе также нефтепродукты, необходимо введение примерно в семь раз больше озона по весовому количеству по отношению к фенолу.

1. А.И.Родионов, В.Н.Клушин, Н.С.Тороченников, *Техника защиты окружающей среды, М.: Химия,*(1989 511.
2. Л.Ф.Комарова, Л.А. Кормина, *Инженерные методы защиты окружающей среды. Техника защиты атмосферы и гидросферы от промышленных загрязнений, Барнаул "Алтай,"* (2000) 395.
3. А.Г.Ветошкин., *Теоретические основы защиты окружающей среды. Высшая школа*, (2008) 397.
4. А.В.Радушев, А.В.Плотникова и др., *Химическая Технология,* **9** №3 (2008) 127.
5. А.В.Плотникова, А.В.Радушев, *Экология и промышленность России*, № 5 (2009) 3.

NEFT VƏ QAZÇİXARMA SƏNAYESİNİN TULLANTİ SULARİNİN FENOLDAN TIMİZLƏNMƏSİ

F.Ə.TEYMUROVA, Ə.Y.NƏZƏROVA, F.Ş.JƏFƏROVA

Müxtəlif müəssisələrin tullantı sularinin fenol və bir sira üzvi qarışıqlardan təmizlənməsinə aid tədqiqatlar aparılmışdır. Aparılan elmi-tədqiqatların nəticəsində məlum olmuşdur ki, fenollu tullantı suların tam təmizlənməsi və zərərsizləşdirilməsi üçün fenolun çəki miqdarına qarşı yeddi dəfə artıq ozon sərf etmək lazımdır. Göstərilmişdir ki, ozonlaşdırılma metodu ilə tullantı suların fenoldan təmizlənməsi sanitar normalarla qəbul edilmiş YQH=0,001q/l əldə edilir.

STUDY OF A PURIFICATION PROCESS PHENOLIC SEWAGES BY A METHOD OF OZONIZATION

F.A.TEYMUROVA, A.Y.NAZAROVA, F.Sh.JAFAROVA

The clearing of sewages of phenol by a method of ozonization has been investigated. It has been established that for complete treatment of phenolic sewages it has been necessary to introduce approximately seven times more ozone on weight to an amount in relation to phenol is necessary.

Редактор: Э.Масимов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ТВЕРДЫЕ РАСТВОРЫ ЗАМЕЩЕНИЯ В СИСТЕМЕ $TlInSe_2 - TlYbSe_2$

М.М.ЗАРБАЛИЕВ, Н.Ф.ГАХРАМАНОВ*, А.М.АХМЕДОВА*, А.Б.МАГЕРРАМОВ

*Сумгаитский государственный университет**
AZ 5008, г.Сумгаит, 43 кв-л
Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр.Джавида, 33

Работа посвящена исследованию взаимодействия в системе $TlInSe_2 - TlYbSe_2$, построена диаграмма состояния этой системы в области концентрации 0÷20моль% $TlYbSe_2$. Определены тип проводимости, ширина запрещенной зоны, эффективные массы носителей заряда. Обсуждается природа возрастания коэффициента Холла с ростом температуры и прохождение его через максимум.

В работах [1-3] представлены результаты по исследованию систем $TlInS_2(Se_2,Te_2) - TlLnS_2(Se_2,Te_2)$, в которых частичным замещением атомов индия атомами лантаноидов получаются твердые растворы и соединения с полупроводниковыми свойствами. Они еще слабо изучены и поэтому представляется интересным исследование взаимодействия в системе $TlInSe_2 - TlYbSe$.

Образцы получены из элементов *Tl, In, Se* марки «ос.ч.» и *Yb* марки «х.ч.» прямым синтезом в откачанных до 10^{-2} *Па* кварцевых ампулах. Печь постепенно нагревали до 1200÷1300К в зависимости от состава смеси, выдерживали при этой температуре 10÷12ч, после чего со скоростью 10÷12град/ч охлаждали до комнатной температуры. Для получения равновесного состояния сплавы отжигали при 900÷1100К в течение 140÷180ч.

Сплавы системы $TlInSe_2 - TlYbSe$ изучали методами дифференциально-термического (ДТА), рентгенофазового (РФА), микроструктурного (МСА) анализов, измерением микротвердости и определением плотности. ДТА образцов осуществляли на низкочастотном терморегистраторе марки НТР-73 с $Pt - Pt/Rh$ - термопарой при скорости нагревания 10град/мин. РФА проводили на аппарате ДРОН (CuK_α -излучение, *Ni*-фильтр). Параметры решетки определяли методом экстраполяции по функции $1/2(\cos^2\theta/\sin\theta + \cos\theta/\theta)$. Микроструктурный анализ полированных шлифов проводили при помощи микроскопа МИМ-7. Микротвердость образцов измеряли на микротвердомере ПМТ-3. Плотность сплавов определяли пикнометрическим методом в толуоле.

Электропроводность и коэффициент Холла в слабых полях измеряли при постоянном токе компенсационным методом, электропроводность в двух, а эффект Холла в четырех направлениях поля при 300÷1000К. Одновременно с электропроводностью при данной температуре определяли термо-э.д.с., возникающую на концах образца при перепаде температуры. Для обеспечения устойчивых диффузионных потоков носителей в условиях неравновесного распределения объемного заряда образцы при данной температуре выдерживали 1÷1,5ч. Погрешность при измерении электропроводности, коэффициента Холла и термо – э.д.с. составляла 1,5, 5 и 6%, соответственно.

По результатам ДТА, МСА и РФА исследуемых сплавов построена диаграмма состояния системы $TlInSe_2 - TlYbSe$ в области концентраций 0÷20моль% $TlYbSe_2$ (Рис.1). МСА и РФА (Рис.2, Рис.3) показывают, что при комнатной

температуре в области концентраций 0÷12моль% $TlYbSe_2$ сплавы однофазны. При дальнейшем увеличении содержания $TlYbSe_2$ сплавы становятся двухфазными.

В результате индицирования рентгенограммы исследуемых сплавов (Таблица) выявлено, что все они кристаллизуются в тетрагональной сингонии на основе решетки $TlInSe_2$. Как следует из Рис.3 по мере увеличения содержания иттербия в составах интенсивности рефлексов в начале закономерно уменьшаются, а затем появляются новые, нехарактерные для соединений $TlInSe_2$ и $TlYbSe_2$ [1,2,3] рефлексы. Полученные данные позволяют предположить наличие области гомогенности на основе $TlInSe_2$. Как видно из Рис.1, в области твердых растворов (0÷12моль% $TlYbSe_2$) параметры решетки аддитивно возрастают с увеличением содержания иттербия в образцах.

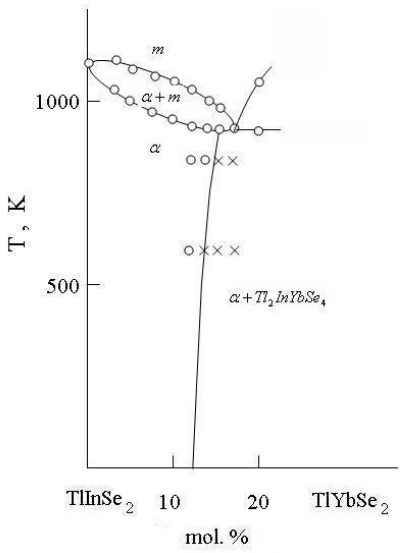


Рис.1.

Диаграмма состояния системы $TlInS_2$ - $TlYbSe_2$ в интервале концентраций 0-20 моль% $TlYbSe_2$

Для уточнения границы области гомогенности дополнительно синтезировали сплавы, содержащие 14; 16; 18 и 20моль% $TlYbSe_2$. Сплавы отжигали при 600 и 800К в течение 150ч и закаливали. Согласно микроструктурному и рентгенофазовому анализам растворимость $TlYbSe_2$ в $TlInSe_2$ при комнатной температуре составляла 12моль% $TlYbSe_2$.

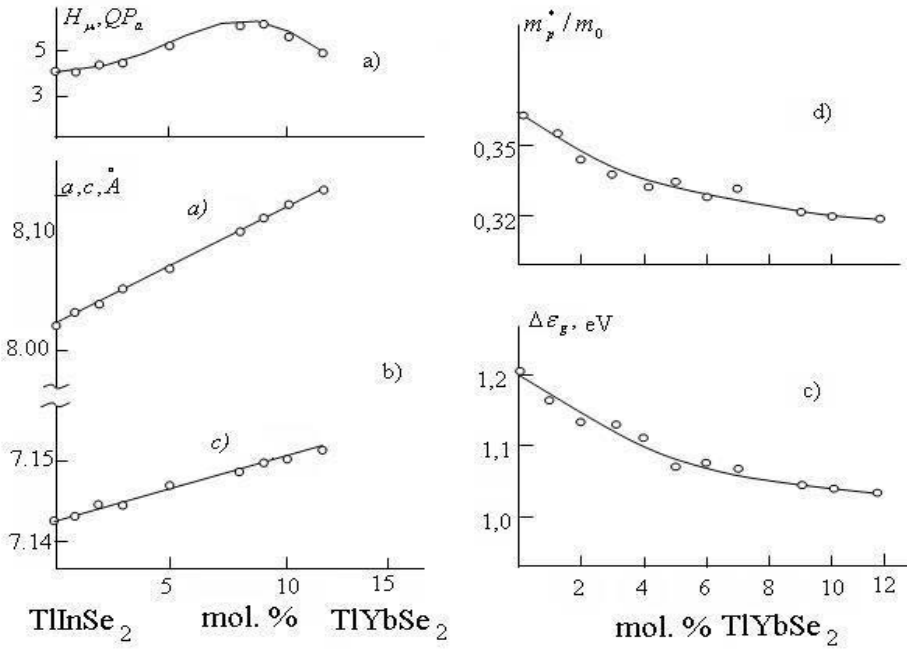


Рис.2.

Концентрационные зависимости микротвердости (a) и параметров элементарной ячейки (b), ширины запрещённой зоны(c) и эффективной массы носителей заряда(d) твердых растворов$TlIn_{1-x}Yb_xSe_2$

На Рис.4. приведены температурные зависимости электропроводности (σ) и коэффициента термо–э.д.с. (α) твердых растворов $TlIn_{1-x}Yb_xSe_2$. Исследованные образцы во всем измеренном интервале температур обладают *p*-типом проводимости. Как следует из этого рисунка электропроводность твердых растворов $TlIn_{1-x}Yb_xSe_2$ в интервале температур ~300÷700К уменьшается с ростом температуры, аналогично электропроводности в металлах.

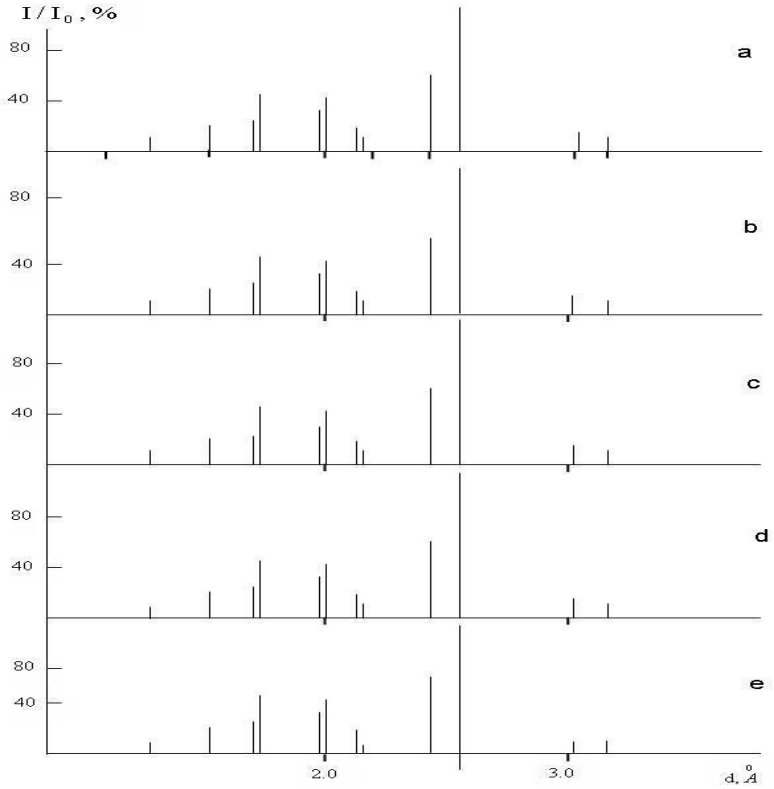


Рис.3.
Схемы рентгенограмм образцов системы $TlInSe_2 - TlYbSe_2$,
содержащих 0 (a), 1(b), 3(c),5 (d) и 9моль% $TlYbSe_2$ (e).

Такой квазиметаллический ход связан с тем, что концентрация носителей тока в этой температурной области не зависит от температуры, а холловская подвижность ограничивается, в основном, рассеянием на акустических колебаниях кристаллической решетки, следовательно, подвижность и электропроводность падают с ростом температуры. В дальнейшем, с увеличением температуры начинает проявляться тепловое возбуждение носителей через запрещенную зону. Так как число термически возбужденных носителей возрастает с температурой экспоненциально, переходная область между примесной и собственной проводимостями будет узкой. Собственные носители быстро становятся доминирующими и проводимость экспоненциально увеличивается с ростом температуры. По высокотемпературным наклонам зависимостей $\ell g\sigma = f(10^3/T)$ определены значения ширины запрещенной зоны исследуемых твердых растворов. Следует отметить, что по мере роста содержания иттербия в составе образцов ширина запрещенной зоны уменьшается, уменьшается и эффективная масса носителей заряда по этой последовательности.

Зависимость коэффициента Холла (R_x) от температуры в твердых растворах $TlIn_{1-x}Yb_xSe_2$ в интервале 400÷700К имеет сложный вид, характеризуемый

аномальным увеличением коэффициента Холла (Рис.5). По мере роста содержания иттербия в составе твердых растворов $TlIn_{1-x}Yb_xSe_2$ начало температуры возрастания коэффициента Холла смещается в область более высоких температур. Как видно из рисунка, возрастание R_x продолжается до некоторой температуры, затем происходит резкое убывание, то есть R_x проходит через максимум, причем с ростом содержания атомов иттербия в составе фаз максимум R_x смещается в сторону более высоких температур. Наблюдаемые особенности могут быть обусловлены различными причинами. Поэтому с целью проверки пригодности той или иной модели для исследованных объектов, необходимо более подробно раскрыть сущность перечисленных моделей.

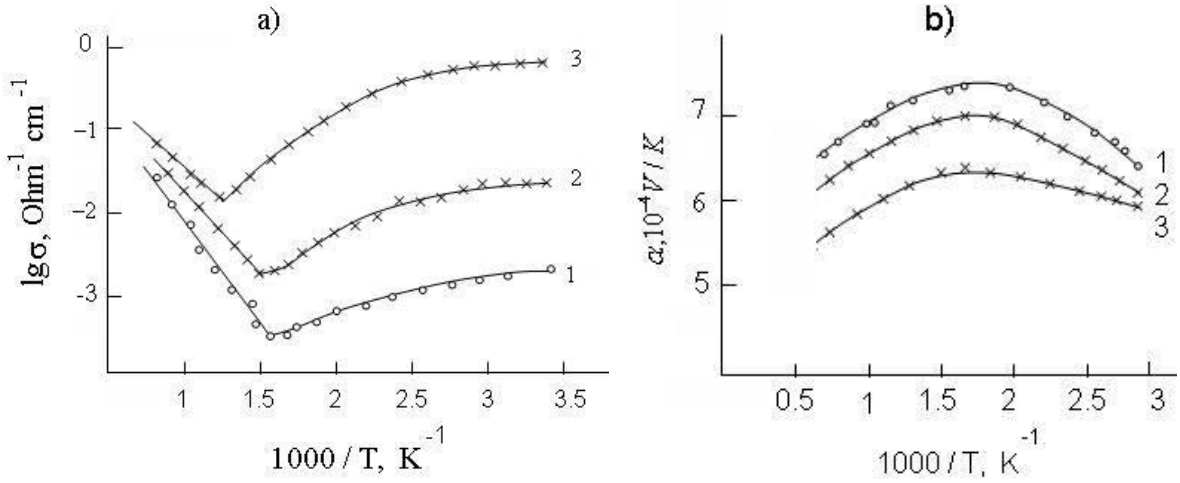


Рис. 4.

Температурные зависимости электропроводности (а) и термо-э.д.с. (б) твердых растворов $TlIn_{1-x}Yb_xSe_2$. Кривые: 1-x=0,01; 2-x=0,05 и 3-x=0,08.

В работах [5,6] максимум на $R_x(T)$ объяснен наличием зоны тяжелых дырок в валентной зоне и зоны тяжелых электронов в зоне проводимости [6], расположенных на расстоянии ΔE от потолка валентной зоны или дна зоны проводимости. В этом случае роль вышележащих зон в проводимости проявляется при достаточно высоких концентрациях носителей заряда, когда уровень Ферми в зоне проводимости (или в валентной зоне) подходит близко к тяжелым зонам, осуществляется переход легких носителей в тяжелые зоны, что приводит к уменьшению концентрации носителей заряда и росту R_x. При дальнейшем повышении температуры уровень Ферми входит в тяжелые зоны, происходит выравнивание уровней Ферми в обеих зонах и в некотором интервале температур стабилизируется E_F, $n(T)$ и $R_x(T)$. Только с наступлением собственной проводимости начинает происходить изменение этих параметров и других кинетических коэффициентов. Если собственная проводимость наступает не при очень высоких температурах, то кривая $R_x(T)$ проходит через острый максимум. Казалось, что эта модель может описать и наши данные. Но, во-первых, в исследованных кристаллах уровень Ферми во всем исследованном интервале температур и концентрации не выходит из запрещенной зоны, т.е. вырождения носителей заряда не наступает. Во-вторых, сведения о наличии подобной зоны в валентной зоне $TlInS_2$ и $TlInTe_2$ отсутствуют.

Имеются данные о возрастании R_x с температурой и в узкозонных полупроводниках [6,7], в которых обращено внимание на влияние сильной

непараболичности зоны проводимости на Холл фактор $R_x = A_r/(en)$. Количественными расчетами показано [6,7], что в случае рассеяния электронов на акустических фононах A_r сильно зависит от степени непараболичности $\beta = k_0T/\varepsilon_g$ и температур-ной зависимости $\varepsilon_g(T)$. В определенном сочетании этих параметров значения A_r и R_x при рассеянии электронов на акустических фононах растет с температурой и с наступлением собственной проводимости уменьшается, проходя через максимум. Следует подчеркнуть, что предложенная модель не может быть применена к нашим кристаллам, так как исследуемые кристаллы являются широкозонными.

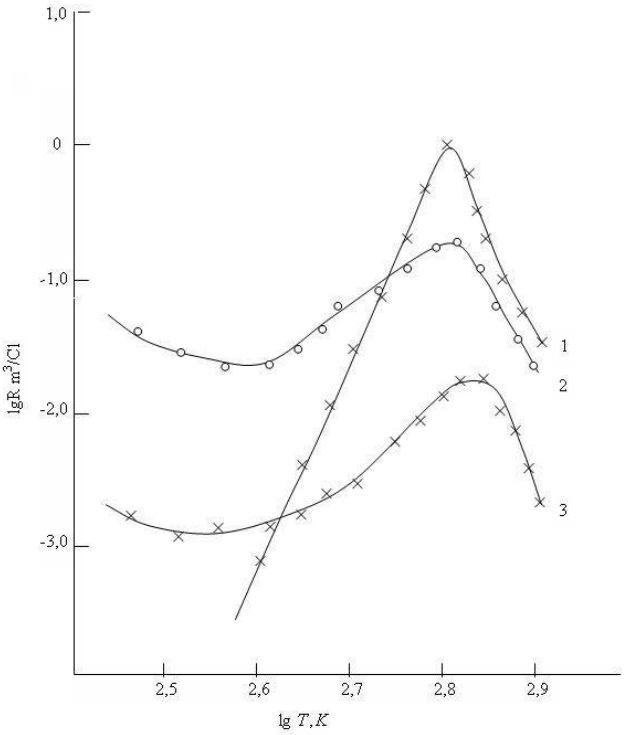


Рис. 5.
Температурные зависимости коэффициента Холла в твердых растворах $TlIn_{1-x}Yb_xSe_2$. Кривые: 1-x=0,01; 2-x=0,05 и 3-x=0,08.

В [9,10] было показано, что в кристаллах $GaAs$ и InP с $n \approx 10^{17} sm^{-3}$ вследствии наличия проводимости по примесной зоне, расположенной вблизи дна зоны проводимости и в запрещенной зоне, на температурной зависимости $R_x(T)$ при $T < 100K$ наблюдалось возрастание R_x и прохождение его через максимум. В то время в образцах с $n \geq 10^{18} sm^{-3}$ во всем интервале температур $(2-300K)R_x$ оставался постоянным. Механизм прохождения через максимум описывается следующим образом: донорные уровни, расположенные на энергетическом расстоянии ΔE от дна зоны проводимости ведут себя как «ловушки» собственных электронов и в интервале температур, когда уровень Ферми входит в эту зону происходит процесс «прилипания» электронов. При достаточно большой концентрации таких уровней образуется зона, по которой осуществляется проводимость по примесной зоне. При этом происходит уменьшение концентрации, что приводит к возрастанию R_x. С дальнейшим повышением температуры происходит насыщение примесных уровней, а при достижении условия $k_0T \geq \Delta E$ начинается «испарение» электронов с этих уровней в зону проводимости, т.е. возрастание концентрации носителей заряда и уменьшение R_x. Таким образом R_x проходит через максимум. При этом проявляется ряд других эффектов. В частности, в кристаллах типа A^3B^5 с высокими подвижностями электронов наблюдается отрицательное магнитосопротивление - $\Delta\rho$ и прохождение его - $\Delta\rho(B)$ через максимум.

При высоких концентрациях примесей зона [1,2] расщепляется, примесные уровни приближаются ко дну зоны проводимости, сливаются с ней и исчезают все наблюдаемые особенности.

Итак, из перечисленных моделей, описывающих наблюдаемые особенности электрических свойств, наиболее приемлемой для исследованных в данной работе материалов, является последняя. В этих кристаллах ширина запрещенной зоны достаточно велика, концентрация носителей заряда для исходных кристаллов мала,

они легко легируются и небольшие отклонения от стехиометрии также создают акцепторные уровни. Для подтверждения наличия в них акцепторной зоны были анализированы кривые $R_x(T)$, $\alpha(T)$ и $\sigma(T)$ (Рис.2., Рис. 4., Рис 1). По спадающей части максимума R_x была вычислена ширина запрещенной зоны. В [6,7,9,10] показано, что по возрастающей части максимума, носящей также активационный характер, можно вычислить энергетический зазор между примесной зоной и потолком валентной зоны (или дном зоны проводимости). В тройном соединении $TlInTe_2$ и в твердых растворах на его основе $TlIn_{1-x}Yb_xS_2(Te_2)$ для энергии активации примесных уровней были получены значения $0{,}2 \div 0{,}5$ *эВ* , которые хорошо согласуются со значениями, полученными на основании данных электрических свойств в сильных электрических полях [8].

1. М.М.Зарбалиев, *Неорганич. Материалы*, **35** (1999) 560.
2. М.М.Зарбалиев, Э.Г.Мамедов, А.М.Ахмедова, Г.И.Зейналов, *Неорганич. Материалы*, **43** (2007) 1432.
3. М.М.Зарбалиев, *Неорганич. Материалы,* **36** (2000) 619.
4. Э.М.Годжаев, Р.А.Керимова, *Неорганич. Материалы*, **40** (2004) 1314.
5. А.А.Андреев, В.Н.Радионов, *ФТП*, **11** (1967) 183.
6. С.А.Зейналов, Неорганич. Материалы, **24** (1988) 1212.
7. С.А.Алиев, *Физика,* **4** №1 (1998) 8.
8. М.М.Зарбалиев, *Физика,* **3** №3 (1997) 30.
9. С.А.Алиев, Ф.П.Кесеменли, Т.С.Лагунова и Д.Н.Наследов, *Phys.Stat.Sol*, **17** (1966) 105.
10. О.В.Емельяненко, Т.С.Лагунова, Д.Н.Наследов, Г.В.Галакин, ФТП, **7** (1965) 315.

$TlInSe_2 - TlYbSe_2$ SISTEMINDƏ BƏRK MƏHLULLARIN ƏVƏZLƏNMƏSI

M.M.ZƏRBƏLIYEV, N.F.QƏHRƏMANOV, A.M.ƏHMƏDOVA, Ə.B.MƏHƏRRƏMOV

İş $TlInSe_2 - TlYbSe_2$ sistemində qarşılıqlı təsirin tədqiqinə həsr olunmuş 0-20 mol% $TlYbSe_2$ konsentrasiya intervalında bu sistemin hal diaqramı qurulmuşdur.Keçiriciliyin növü, qadağan zonanın eni, yükdaşıyıcıların effektiv kütlələri təyin olunmuşdur.

Holl əmsalının temperaturu yüksəlməsi ilə artmasını və onun maksimumdan keçməsinin təbiəti təhlil olunmuşdur.

SUBSTITUTION OF SOLID SOLUTION IN $TlInSe_2 - TlYbSe_2$-SYSTEM

M.M.ZARBALIEV, N.F.GAHRAMANOV, A.M.AHMEDOVA, A.B.MAHARRAMOV

The research of the mutual interaction in the $TlInSe_2 - TlYbSe_2$ system has been presented. It has been constructed a phase diagram of this system in the 0÷20mole% $TlYbSe_2$ concentration interval. It has been defined the type of the conductivity, the width of the forbidden gap and the effective masses of the charge carriers in $TlIn_{1-x}Yb_xSe_2$ solid solutions.

It has been analyzed the nature of the Hall coefficient with temperature and its rising and passing through maximum in the article.

Редактор: С.Мустафаева

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПАРАМЕТРА СПИНОВОЙ ЗАВИСИМОСТИ НЕУПРУГОГО РАССЕЯНИЯ НЕЙТРОНОВ

Х.Ш.АБДУЛЛАЕВ, М.Ш.МАМЕДОВ, Н.Р.МЕММЕДОВ*

Бакинский Государственный Университет
AZ 1145, Bakı, Z.Xəlilov, 23
*Институт физики НАН Азербайджана**
AZ-1143, Bakı, H.Cavid pr., 33

Из анализа угловых распределений неупруго рассеянных нейтронов с начальной энергией 10,3*МэВ* определен параметр спиновой зависимости σ для ядер *Al, Si, S, Ca, Fe, Cu*. Экспериментально определенные значения σ ниже величин, получаемых в расчетах по модели независимых частиц. Объяснение наблюдаемого эффекта как проявление взаимодействия между частицами, отличающегося от парных корреляций, кажется наиболее правдоподобным.

Исследование угловых распределений частиц, испущенных из составного ядра, дает возможность определить параметр спиновой зависимости сечения неупругого рассеяния нейтронов σ. При этом обычно используют выражение для угловой зависимости дифференциальных сечений рассеяния нейтронов, полученное Эриксоном и Струтинским [1]

$$\frac{\partial^2\sigma_{ab}(E_b,\theta)}{\partial E_b,\partial\Omega_b}=c\left\{1+\frac{1}{12}\frac{<\ell_a^2(E_a)><\ell_b^2(E_b)}{\sigma^4}P_2(\theta)\right., \qquad (1)$$

где c – некоторая константа, $<l_a^2(E_a)>$ и $<\ell_b^2(E_b)>$ - средние квадраты орбитальных угловых моментов падающих и вылетающих нейтронов, соответственно; P_2 – полином Лежандра второго порядка.

Средний квадрат углового момента определяется следующим соотношением

$$<\ell^2(E)>=\sum_0^\infty(2\ell+1)T_\ell(E)\ell(\ell+1)/\sum_0^\infty(2\ell+1)T_\ell(E), \qquad (2)$$

где T_ℓ - коэффициент проницаемости, рассчитываемый по оптической модели ядра.

Соотношение (1) получено для случая слабой связи, т.е. для малой анизотропии углового распределения.

Для определения параметра спиновой зависимости σ были использованы дифференциальные сечения рассеяния нейтронов с начальной энергией 10,3*МэВ*, неупруго рассеянных на ядрах *Al, Si, S, Ca, Fe, Cu* [2]. Угловые распределения, соответствующие интервалу энергий вылетающих нейтронов от 0,5 до 5*МэВ* были представлены в виде [1]

$$\sigma(\theta)=\frac{1}{4\pi}\sum_{\ell=0}^{N_0}B_\ell P_\ell(\theta).$$

Величина параметра спиновой зависимости вычислялась из сравнения нормированного по B_0 коэффициента B_2 при полиноме Лежандра $P_2(\theta)$ с выражением (1).

Для вычисления средних квадратов угловых моментов использовались коэффициенты проницаемости из работы [3].

Полученные значения σ^2 представлены в Таблице 1.

Таблица 1.

Параметры σ^2 и отношения $I_{экс}/I_0$, полученные из анализа угловых распределений нейтронов, испущенных из ядер с энергиями 0,5-5 *МэВ*.

Элемент	*Al*	*Si*	*S*	*Ca*	*Fe*	*Cu*
σ^2	4,7±1,3	4,8±1,4	5,8±1,5	5,2±1,5	8,7±2,4	10,3±2,4
$I_{экс}/I_0$	0,6±0,2	0,5±0,1	0,6±0,2	0,5±0,2	0,6±0,2	0,6±0,2

Здесь $I_{экс}$ и I_0 соответственно момент инерции ядра, определенный из экспериментальных результатов и момент инерции ядра, рассматриваемого как твердое тело, имеющего радиус R и массу Am, т.е. равный

$$\mathrm{I}_0 = \frac{2}{5} mAR^2$$

Указанные ошибки обусловлены ошибками экспериментальных данных. Кроме того, значения σ могут содержать систематические ошибки из-за присутствия в анализируемом диапазоне энергий нейтронов, испущенных в предравновесной стадии реакции. Но они не могут существенно изменить полученные результаты, так как в рассматриваемом интервале энергий доля нейтронов из неравновесных процессов в интегральных спектрах меньше 10%. Это может привести к ошибке в параметре спиновой зависимости ≤15%.

Наши данные сравнивались с данными других работ, в которых параметр спиновой зависимости извлекается из экспериментальных угловых распределений продуктов реакций *(n,p), (n,α), (n,n')*. Наши данные наиболее хорошо согласуются с результатами работы [4], в которой параметр σ получен из анализа спектров упруго рассеянных нейтронов с начальной энергией 14*МэВ*. Экспериментальные величины σ, в основном, ниже значений, получаемых в расчетах по модели независимых частиц с твердотельным моментом инерции

$$\sigma^2 = \frac{\mathrm{I}_0 T}{\hbar^2}, \qquad (3)$$

где T – ядерная температура.

Уменьшение момента инерции ядра по сравнению с твердотельным, по-видимому, может быть обусловлено тремя причинами:

а) влиянием остаточного взаимодействия сверхпроводящего типа;

б) влиянием оболоченных эффектов;

в) наличием в ядре взаимодействия частиц, отличающегося от парных корреляций, которые, как показано в работе [5], могут заметно уменьшить σ.

Уменьшение момента, обусловленное влиянием парных корреляций, незначительно, так как характерная энергия возбуждения остаточного ядра близка или даже выше энергии фазового перехода, которая для исследованных ядер составляет ~(5÷10)*МэВ*.

При рассмотрении результатов данной работы совместно с [4] корреляции между величиной момента инерции и магическими числами не обнаруживается. Это дает возможность утверждать, что уменьшение I не связано с оболочечными эффектами.

Таким образом, объяснение наблюдаемых эффектов как проявление остаточного взаимодействия частиц, отличающегося от парных корреляций, кажется наиболее правдоподобным. Поэтому знание экспериментальных моментов инерций ($I_{эксп}$) дает возможность оценить константу асимметричной по спину части взаимодействия из соотношения, полученного в работе [5]

$$I_0 / I_{эксп} = 1 + gf^2/2, \qquad (5)$$

где I_0 и $I_{эксп}$ – твердотельный и экспериментально наблюдаемый моменты инерции ядра, соответственно, g – плотность одночастичных состояний вблизи уровня Ферми, $gf^2/2$- константа асимметричной по спину части взаимодействия.

Величина $gf^2/2$, извлеченная из наших данных, качественно согласуется со значением, полученным в работе [4] и используемым в теории ферми-жидкости [6].

1. T.Ericson, V.Strutinski, *Nucl. Phys*, **8** (1985) 284.
2. Н.С.Бирюков, Б.В.Журавлев, *Препринт ФЕИ*, (1998) 457.
3. У.С.Эммерих, *Физика быстрых нейтронов*, *М.*, **2** (1986) 55.

4. А.В.Игнатюк, *Нейтронная физика, Обнинск*, **1** (1974) 325.
5. А.В.Игнатюк, *Изв.АН СССР, сер.физ.*, **38** (1974) 170.
6. А.В.Мигдал, *Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер, «Наука», М*. (1985).

NEYTRONLARIN QEYRİ-ELASTIKI SƏPİLMƏSİNİN SPİN ASILILIQ PARAMETRİNİN TƏYİNİ

X.Ş.ABDULLAYEV, M.Ş.MƏMƏDOV, N.R.MƏMMƏDOV

Al, *Si, S, Ca, Fe, Cu* nüvələri üçün başlanğıc enerjisi 10,3*MeV* olan neytronların qeyri –elastiki səpilməsinin bucaq paylanmasının təhlilindən σ spin asılılıq parametrləri təyin edilmişdir. σ -nın eksperimental üsulla təyin edilən qiymətləri nüvənin birnuklonlu modelinə görə hesablama ilə alınan qiymətlərindən aşağı olur. Müşahidə edilən effektin izahı kimi nuklonlar arasındakı cüt korrelyasiya qarşılıqlı təsirindən fərqli qarşılıqlı təsirin olduğunu göstərmək olar.

DEFINITION OF OF THE SPIN CUT –OFF PARAMETER OF INELASTIC SCATTERED NEUTRONS

Kh.Sh.ABDULLAYEV, M.Sh.MAMEDOV, N.R.MEMMEDOV

The spin cut-off parameter *Al*, *Si, S, Ca, Fe, Cu* nuclei has been obtained from the analysis of angular distributions of inelastic scattered neutrons with the initial energy 10,3*MeV*. It has been shown that the experimental values of σ are below data calculated from independent particles model. Observed effect can be probably explained by particles interaction which differs from the pair correlation.

Редактор: О.Абдинов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ВОЗДЕЙСТВИЕ γ-ОБЛУЧЕНИЯ НА ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ И АС-ПРОВОДИМОСТЬ МОНОКРИСТАЛЛОВ СЕЛЕНИДА ГАЛЛИЯ

С.Н.МУСТАФАЕВА[1], М.М.АСАДОВ[2], А.А.ИСМАИЛОВ[1]

Институт физики НАН Азербайджана[1]
AZ-1143, Баку, пр. Г. Джавида, 33
Институт химических проблем НАН Азербайджана[2]
AZ-1143, Баку, пр. Г. Джавида, 29

Исследование дозовых (D_γ=5·10^4÷2.25·10^{6}рад) и частотных (f=5·10^4÷3.5·10^{7}Гц) зависимостей диэлектрических коэффициентов (ε и ε'') и ас-проводимости (σ_{ac}) поперек слоев монокристаллов GaSe показало, что γ-облучение приводит к существенному уменьшению ε и увеличению ε'' в области низких частот и трехкратному увеличению σ_{ac}. В области высоких частот (f >3.2·10^{6}Гц) существенной дозовой и частотной зависимостей ε и ε'' не наблюдалось. Показано, что по мере накопления дозы γ-облучения в монокристалле GaSe дисперсия ε уменьшается, а дисперсия ε'' увеличивается.

В работах [1,2] было показано, что в монокристаллах p-GaSe при низких температурах (T<200K) на постоянном токе (dc) и при T=300K на переменном токе (ac) имеет место прыжковый механизм переноса заряда по состояниям, локализованным вблизи уровня Ферми. В настоящей работе приведены результаты измерений диэлектрических свойств и ас-проводимости γ-облученных монокристаллов p-GaSe в переменных электрических полях в частотном диапазоне f=5·10$^{4÷}$3.5·10^{7}Гц.

Образцы из GaSe были изготовлены в сэндвич-варианте с электродами из серебряной пасты. Толщина монокристаллических образцов из GaSe составляла ~200мкм. Все измерения проведены при 300K резонансным методом с помощью куметра TESLA BM 560.

γ-облучение образцов проведено на радиационной химической установке непрерывного действия (РХУНД-20000) от источника Co^{60}. Энергия γ-квантов составляла 1.25МэВ. Доза облучения накапливалась путем последовательных экспозиций в одном и том же образце. Измерения образцов проводились после каждого облучения.

При фиксированных частотах произведены замеры диэлектрической проницаемости образца GaSe до и после γ-облучения дозами 5·10^4 и 2.25·10^{6}рад (Рис.1). В необлученном образце GaSe (Рис.1, кривая 1) в области частот f=5·10^4÷4·10^{5}Гц значение ε существенно уменьшалось (в 8 раз) по мере роста частоты, а затем вплоть до 3.5·10^{7}Гц почти не претерпевало каких-либо изменений. После γ-облучения этого образца дозами 5·10^4 и 2.25·10^{6}рад диэлектрическая проницаемость характеризовалась менее ощутимой дисперсией. Наблюдаемое монотонное уменьшение ε с ростом частоты свидетельствует о релаксационной дисперсии в монокристалле GaSe. В области сравнительно высоких частот (f>3.2·10^{6}Гц) ε образца GaSe, облученного дозами 5·10^4 и 2.25·10^{6}рад, почти не изменялась с увеличением частоты. По мере накопления дозы в образце GaSe диэлектрическая проницаемость уменьшалась по величине, особенно при низких частотах. На Рис.2 приведена дозовая зависимость диэлектрической проницаемости GaSe (кривая 1) на частоте f=5·10^{4}Гц. Как видно из Рис.2, после максимальной дозы γ-облучения диэлектрическая проницаемость GaSe уменьшалась почти в 8 раз. С увеличением частоты зависимость ε от D_γ уменьшалась и почти не проявлялась при высоких частотах (f>3.2·10^{6}Гц). Т.е. при

f>3.2·10^{6}Гц ε GaSe практически не зависела как от частоты, так и от дозы γ-облучения.

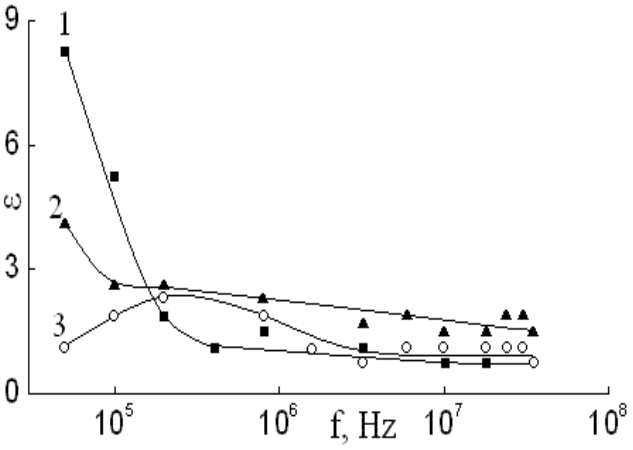


Рис. 1.

Частотные зависимости диэлектрической проницаемости монокристалла GaSe до (кривая 1) и после γ-облучения дозами D_γ, рад: 2–5·10^4; 3 – 2.25·10^6.

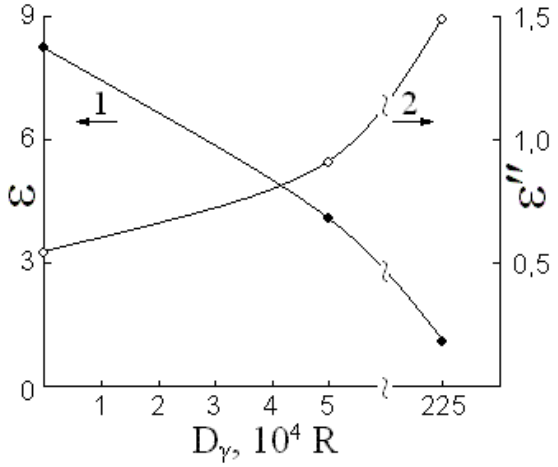


Рис. 2.

Дозовые зависимости ε(1) и ε″(2) монокристалла GaSe на частоте f=5·10^{4}Гц.

Изучены также частотные зависимости мнимой составляющей комплексной диэлектрической проницаемости (ε″) монокристалла GaSe при различных дозах γ-облучения (Рис.3). Из Рис.3 видно, что по мере увеличения дозы ε″ во всем изученном диапазоне частот в отличие от ε растет и претерпевает более ощутимую дисперсию. Дозовая зависимость ε″(D_γ) монокристалла GaSe приведена на Рис.2 (кривая 2).

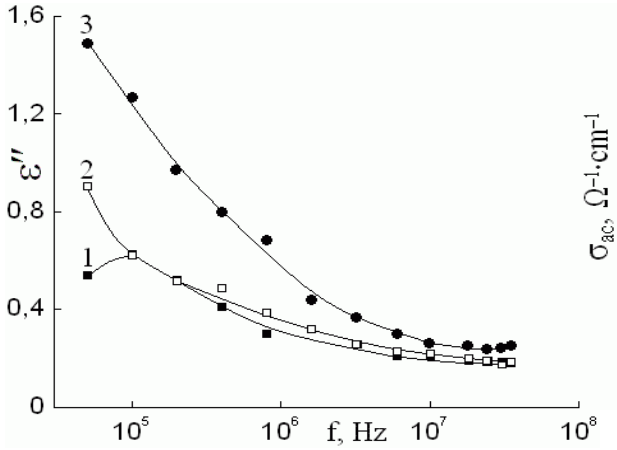


Рис. 3.

Дисперсионные кривые ε″(f) монокристалла GaSe при дозах γ-облучения D_γ, рад: 1 – 0; 2 – 5·10^4; 3 – 2.25·10^6.

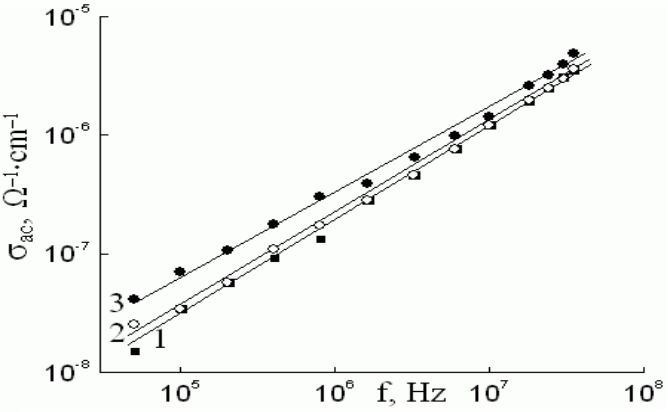


Рис. 4.

Частотные зависимости ac-проводимости монокристалла GaSe до облучения (кривая 1) и после γ-облучения дозами D_γ, рад: 2 – 5·10^4; 3 – 2.25·10^6.

На Рис.4 представлены частотные зависимости ac-проводимости исследуемого монокристалла GaSe при 300К до облучения (кривая 1) и после γ-облучения (кривые 2 и 3). γ-облучение образца GaSe приводило к увеличению его ac-проводимости (примерно в 3 раза). Из Рис.4 видно, что по мере увеличения частоты ac-проводимость GaSe до и после γ-облучения растет по степенному закону σ_{ac}~f $^{0.8}$, характерному для прыжковой проводимости [3]. По теории прыжковой

проводимости на переменном токе среднее расстояние прыжков определяется по формуле

$$R = \left(\frac{1}{2\alpha}\right)\ln\left(\frac{\nu_\phi}{f}\right), \qquad (1)$$

где α – постоянная спада волновой функции локализованного носителя заряда $\psi \sim e^{-\alpha r}$, $\alpha=1/a$ (a – радиус локализации), ν_ϕ – фононная частота, $1/f=\tau$ – среднее время прыжка. Вычисленное по формуле (1) значение R для исследуемого монокристалла GaSe составляло 187Å. При вычислении R для радиуса локализации взято значение a=34Å, полученное экспериментально для монокристалла GaSe в работе [2]. Значение ν_ϕ для GaSe – порядка 10^{12}Гц. Для τ получено значение $5.7\cdot10^{-8}$с.

Полученные экспериментальные результаты позволили оценить плотность локализованных состояний вблизи уровня Ферми (N_F), по которым осуществляются прыжки носителей заряда [4]

$$\sigma_{ac}(f) = \frac{\pi^3}{96} e^2 kTN_F^2 a^5 f \left[\ln\left(\frac{\nu_\phi}{f}\right)\right]^4, \qquad (2)$$

где e – заряд электрона, k – постоянная Больцмана. Полученные для N_F значения при различных дозах γ-облучения образца GaSe сведены в Таблице.

Таблица

Плотность и разброс локализованных вблизи уровня Ферми состояний для монокристалла GaSe.

Доза облучения D_γ, рад	N_F, эВ$^{-1}\cdot$см$^{-3}$	ΔE, эВ
0	$9.25\cdot10^{17}$	0.079
$5\cdot10^4$	$9.6\cdot10^{17}$	0.076
$2.25\cdot10^6$	$1.3\cdot10^{18}$	0.056

Из Таблицы видно, что по мере накопления дозы γ-облучения в монокристалле GaSe значение N_F увеличивается. Оценен энергетический разброс локализованных вблизи уровня Ферми состояний по формуле [3]

$$\Delta E = \frac{3}{2\pi R^3 \cdot N_F}. \qquad (3)$$

Значения ΔE до и после γ-облучения монокристалла GaSe также приведены в Таблице, откуда следует, что с ростом D_γ полоса энергий ΔE сужается. Концентрация ловушечных состояний в запрещенной зоне монокристалла GaSe ($N_t=N_F\cdot\Delta E$) составляла $7.3\cdot10^{16}$см$^{-3}$. Следовательно, можно констатировать, что γ-облучение вплоть до дозы $2.25\cdot10^6$рад не создает каких-либо дополнительных локализованных центров в GaSe, а только лишь приводит к их энергетическому уплотнению.

Итак, изучение частотных зависимостей диэлектрических коэффициентов и ас-проводимости γ-облученного монокристалла GaSe позволило установить релаксационную природу дисперсии ε и ε'', механизм переноса заряда, оценить плотность локализованных вблизи уровня Ферми состояний и их энергетический разброс, среднее время и расстояние прыжков, а также концентрацию глубоких ловушек, ответственных за проводимость на переменном токе. Показано, что после γ-облучения монокристалла GaSe дозой $5\cdot10^4 \div 2.25\cdot10^6$рад существенно влияет на величины действительной (ε) и мнимой (ε'') составляющих комплексной диэлектрической проницаемости, а также в 3 раза увеличивает его ас-проводимость вдоль *C*-оси.

1. С.Н.Мустафаева, М.М.Асадов, *Неорганические материалы,* **24** (1988) 917.
2. С.Н.Мустафаева, *Неорганические материалы,* **30** (1994) 619.
3. Н.Мотт, Э.Дэвис, *Электронные процессы в некристаллических веществах, Мир, М.,* (1974) 472.
4. M.Pollak, *Phil. Mag.,* **23** (1971) 519.

QALLİUM SELENİD MONOKRİSTALLARININ DİELEKTRİK ƏMSALLARINA VƏ AC-KEÇİRİCİLİYİNƏ γ-ŞÜALANMANIN TƏSİRİ

S.N.MUSTAFAEVA, M.M.ƏSƏDOV, Ə.Ə.İSMAYLOV

γ – kvantları ilə şüalanmış GaSe monokristalının dielektrik xassələri (ε-dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsi və ε'' - dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsi) və keçiriciliyi (σ_{ac}) f=5·10^4÷3.5·10^7 Hs tezlik intervalında tədqiq edilmişdir. Göstərilmişdir ki, D_γ=5·10^4÷2.25·10^{6}rad dozasında γ–kvantları ilə şüalanmış GaSe monokristalının dielektrik nüfuzluğu kəskin azalır, ε'' və σ_{ac} qiymətləri isə nəzərə çarpacaq qədər artır. Yüksək tezliklərdə (f≥3.2·10^{6}Hs) ε və ε'' doza və tezlik aslılıqları zəif olur. GaSe monokristalının dielektrik xassələri və keçiriciliyi monokristalın laylarına perpendikulyar istiqamətdə kifayət qədər artırlar. Müəyyən edilmişdir ki, γ – şüalanmanın dozası artdığca GaSe monokristalında dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin dispersiyası azalır, xəyali hissəsinin dispersiyası isə artır.

THE EFFECT OF γ-IRRADIATION ON DIELECTRIC COEFFICIENTS AND *AC*-CONDUCTIVITY OF GALLIUM SELENIDE SINGLE CRYSTALS

S.N.MUSTAFAEVA, M.M.ASADOV, A.A.ISMAILOV

The investigation of dose (D_γ=5·10^4÷2.25·10^{6}rad) and frequency (f =5·10^4 to 3.5·10^{7}Hz) dependences of dielectric coefficients (ε and ε'') and *ac*-conductivity (σ_{ac}) across the layers of GaSe single crystals has shown that γ-irradiation leads to significant decrease of ε and increase of ε'' and σ_{ac} in the low-frequency range. The essential dose and frequency dependences of ε and ε'' in the high frequencies range (f >3.2·10^{6}Hz) have not been observed. It has been shown that with increasing dose of γ-irradiation the dispersion of ε has decreased, but ε'' dispersion has increased.

Редактор: Р.Сардарлы

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

$Cu_3In_5S_9$ MONOKRISTALINDA ALÇAQTEZLIKLI CƏRƏYAN OSSILYASIYASI

L.H.HƏSƏNOVA, Ə.Z.MƏHƏMMƏDOV, S.Ə.CAHANGIROVA

Bakı Dövlət Universiteti
AZ 1148, Bakı, Z. Xəlilov küç., 23

Yeni mürəkkəb $Cu_3In_5S_9$ birləşməsinin təkmil monokristalları alınmış və elektrik sahəsinin və işığın təsirilə stimullaşdırılmış elektrik dayanıqsızlığı və alçaqtezlikli cərəyan ossilyasiyaları tədqiq olunmuşdur.

Yarımkeçiricilərdə müxtəlif təsirlərlə stimullaşdırılmış elektrik dayanıqsızlığının və alçaqtezlikli cərəyan ossilyasiyalarının tədqiqi müasir bərk cisimlər fizikasında tətbiqi cəhətdən əhəmiyyət kəsb edir. Belə ki, onlar yarımkeçiricilərdə baş verən müxtəlif proseslərin elektron mexanizmini aydınlaşdırmağa və idarə olunan parametrlərə malik elektrik impulsu generatorlarını yaratmağa imkan verir.

Alçaqtezlikli cərəyan rəqsləri xarici görünüşünə və xarakteristikalarına görə iki qrupa bölünür:

1) fundamental udma oblastından olan işığın təsirilə yaranan müntəzəm alçaqtezlikli cərəyan rəqsləri;

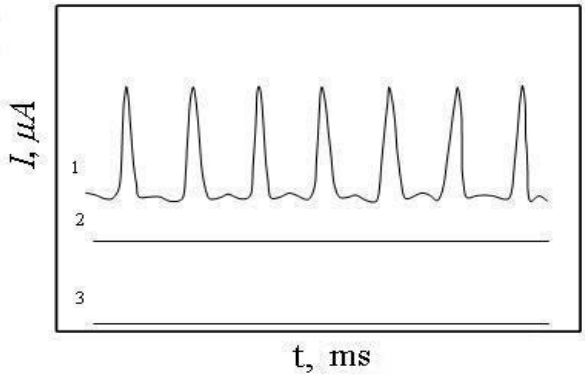
2) nümunəyə $U \geq U_{kr}$ gərginliyinin və aşqar oblastdan olan işığın birgə təsiri nəticəsində yaranan alçaqtezlikli müntəzəm cərəyan rəqsləri [1].

Bu işdə gərginliyin və işığın birlikdə təsiri nəticəsində $Cu_3In_5S_9$ monokristalında müşahidə olunan alçaqtezlikli cərəyan rəqsləri tədqiq olunmuşdur.

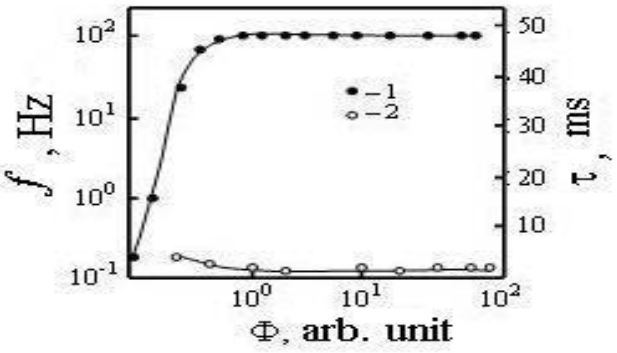
Yeni üçqat $Cu_3İn_5S_9$ yarımkeçirici birləşməsi $CuInS_2$-In_2S_3 sisteminin öyrənilməsi nəticəsində alınmışdır. O, layvari quruluşa malik olub, monoklin strukturda kristallaşır və parametrləri a=6,60; b=6,91; c=8,12A^0; β=89^0; z=1 [2]. Göründüyü kimi elementar qəfəsin parametrləri elə qiymət alır ki, ona kvazitetraqonal sinqoniyaya malik kristal kimi baxmaq olar. Fotokeçiriciliyin tədqiqi göstərmişdir ki, $Cu_3In_5S_9$ monokristalı 0,8-1,8 eV oblastında yüksək fotohəssaslığa malikdir [3, 4].

İşdə ölçüləri 0,2x3x4 mm olan düzbucaqlı parallelepiped şəkilli nümunələr tədqiq olunmuşdur. Omik kontaktlar gümüş pastasından qoyulmuşdur. Təcrübə zamanı cərəyan laylar boyunca axmış, işıq isə laylara perpendikulyar istiqamətdə düşmüşdür.

Ölçmələr göstərmişdir ki, birinci növ alçaqtezlikli cərəyan rəqsləri yalnız fundamental oblastdan olan işığın (hν>1,45eV) və kritik gərginlikdən böyük gərginliyin birgə təsiri nəticəsində müşahidə olunur.



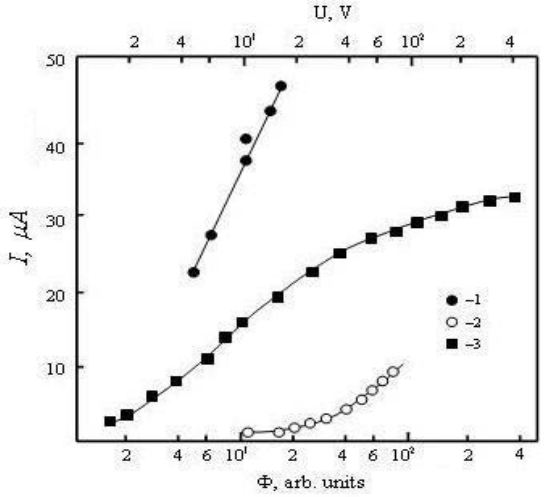
Şək.1.
$Cu_3In_5S_9$ monokristallarında işığın və elektrik sahəsinin birgə təsiri zamanı cərəyanın zamandan asılılığı: Φ≠0, U>U_{kr} (1 əyrisi); Φ=0, U>U_{kr} (2 əyrisi); Φ≠0, U<U_{kr} (3 əyrisi); T=77K.



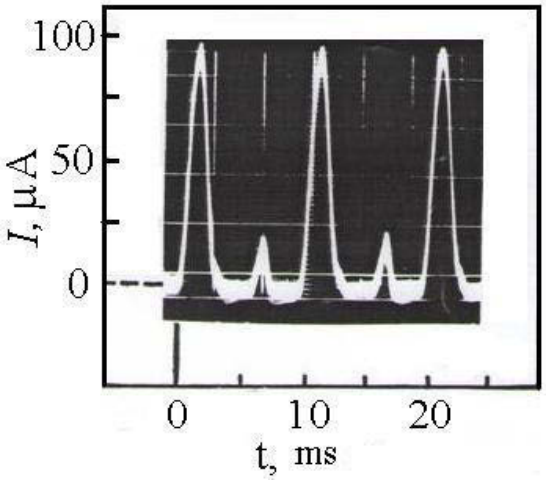
Şək.2.
$Cu_3In_5S_9$ monokristallarında rəqslərin tezliyinin (1 əyrisi) və davamlılığın (2 əyrisi) işığın intensivliyindən asılılığı. T=77K, λ=0,85mkm.

Baxılan nümunələr üçün 77 K temperaturda kritik sahə~50 V/sm olmuşdur (Şək.1, 1 əyrisi). $E>E_{kr}$ lakin Φ=0 və əksinə Φ≠0, $E<E_{kr}$ olduqda ossilyasiya müşahidə olunmur. Ayrı-ayrı cərəyan impulsları üçbucaq şəklində olur. Müəyyən olunmuşdur ki, rəqslərin tezliyi nümunəyə təsir edən işığın intensivliyindən asılıdır və maksimal intevsivlik $2\cdot10^3$lk-dur. Zəif intensivliklərdə (Φ≤1nis. $vah. = \frac{\Phi_{max.}}{400}$) intensivlik artdıqca rəqslərin tezliyi 0,2-dən 100 Hs-ə qədər kəskin artır, sonra isə demək olar ki, sabit qalır (Şək.2, 1 əyrisi). Ayrı-ayrı impulsların uzunluğu (impulsun amplitudunun yarısı) Φ≤1.0 nis.vah. olduqda işığın intensivliyi artdıqca azalır, 1.0≤Φ≤400 nis.vah. oblastında isə demək olar ki, dəyişmir (Şək.2, 2 əyrisi).

İşdə həmçinin rəqslərin amplitudunun nümunəyə tətbiq olunmuş gərginlikdən və işığın intensivliyindən asılılığı öyrənilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, (5÷80)V gərginlik intervalında 400 nis.vah. intensivliyə qədər impulsun amplitudu monoton artır (Şək.3). Optimal şəraitdə rəqslərin amplitudu (I_0) 100mkA-ə çatır.

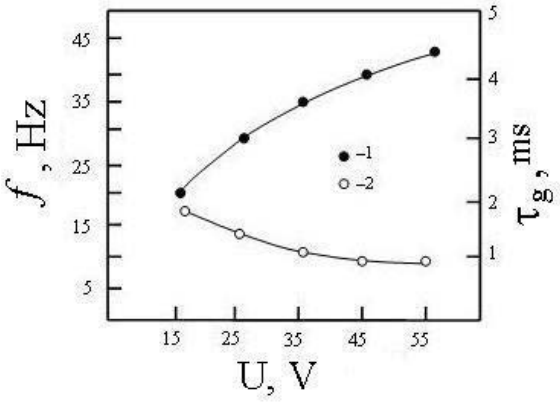


Şək.3.
$Cu_3In_5S_9$ monokristallarında rəqslərin tezliyinin (1 əyrisi) və davamlılığın (2 əyrisi) işığın intensivliyindən asılılığı. T=77K, λ=0,85mkm.



Şək.4.
$Cu_3In_5S_9$ monokristallarında əlavə hormoniyaların generasiyası. T=77K, λ=0,85mkm, Φ=150 nis.vah., U=15V.

Nümunəyə $\lambda=\lambda_0$ (λ_0-məxsusi fotokeçiriciliyin maksimumuna uyğun dalğa uzunluğudur) dalğa uzunluğu və böyük intensivlikli işığın və U≥20V gərginliyin birgə təsiri zamanı dövrədə əlavə harmoniya yaranır (şək.4). Həmçinin müəyyən olunmuşdur ki, $0{,}50 \le \lambda \le \lambda_0$ diapozonundan işıqlandırma zamanı kritik sahənin qiyməti (E_{kr}) intensivlikdən asılı olur. Φ>1.0 nis.vah. intensivliyində kritik sahə 15V/sm, Φ≤1.0nis.vah. intensivliyində isə kritik sahə 50V/sm-dən az olmur.



Birinci halda rəqslərin tezliyi və ayrı-ayrı impulsların davamlığı (τ_g) sahənin gərginliyindən asılı deyil. Nümunəyə tətbiq olunmuş sahənin gərginliyi artdıqca yalnız implusların amplitudu artır. İkinci halda da rəqslərin tezliyi və impulsların davamlığı sahənin gərginliyindən zəif asılıdır.

Şək.5.
$Cu_3In_5S_9$ monokristallarında tezliyin (1 əyrisi) və impulsun davamlılığın (2 əyrisi) gərginlikdən asılılığı.

(Şək.5, 1 və 2 əyriləri). $\lambda = \lambda_0$ olduqda, Φ artdıqca rəqslərin amplitudu artır və intensivliyin müəyyən kritik qiymətlərindən böyük qiymətlərdə ($\Phi > \Phi_{kr}$) alçaqtezlikli cərəyan ossilyasiyaları aradan çıxır, yəni hər bir nümunə üçün xarici işıqlanmanın müəyyən qiymətlərindən böyük qiymətlərində generasiya müşahidə olunmur. Nümunələrdə generasiya onların fotoelektrik xassələri ilə müəyyənləşir. Ölçmələr göstərmişdir ki, yalnız sabit fotoelektrik yaddaşa malik nümunələrdə yaxşı nəticələr alınır.

1. А.Ш.Абдинов, А.Г.Кязым-заде, А.А.Ахмедов, *ФТП,* **11** (1977) 2026.
2. В.И.Тагиров, Н.Ф.Гахраманов, А.Г.Гусейнов, *Новый класс тройных полупроводниковых соединений типа* $A_3^I B_5^{III} C_9^{VI}$. *«Изд. БГУ» Баку*, (2001) 300.
3. В.И.Тагиров, Л.Г.Гасанова, А.Г.Кязым-заде, А.З.Магомедов, *ФТП*, **18** (1984) 15.
4. Л.Г.Гасанова, А.З.Магомедов, *Bakı Universitetinin xəbərləri, fiz-riy.ser.*, №1 (2007) 117.

OSCILLATION OF LOW FREQUENCY CURRENTS IN MONOCRYSTALS OF $Cu_3In_5S_9$

L.H.HASANOVA, A.Z.MAHAMMADOV, S.A.JAHANGIROVA

It has been practically applicable to investigate in semiconductors the electric instabilities stimulated at several electronic processes. In this paper the low frequency current oscillations arises by common influence of light and electrical field have been investigated in new compound semiconductors of $Cu_3In_5S_9$. The applied voltage and light intensity regions, which arises oscillations, have been find out.

НИЗКОЧАСТОТНЫЕ ОСЦИЛЯЦИИ ТОКА В МОНОКРИСТАЛЛАХ $Cu_3In_5S_9$

Л.Г.ГАСАНОВА, А.З.МАГОМЕДОВ, С.А.ДЖАХАНГИРОВА

Исследованы низкочастотные колебания тока в монокристалле $Cu_3In_5S_9$ при одновременном воздействии внешнего напряжения и света. Установлено, что низкочастотные колебания наблюдаются лишь при одновременном воздействии света из области фундаментального поглощения и внешнего напряжения, большего некоторого критического.

Редактор: С.Мехтиева

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

$FeGa_2S_4$–ün DƏYIŞƏN ELEKTRIK SAHƏSINDƏ ELEKTRIKKEÇIRICILIYI

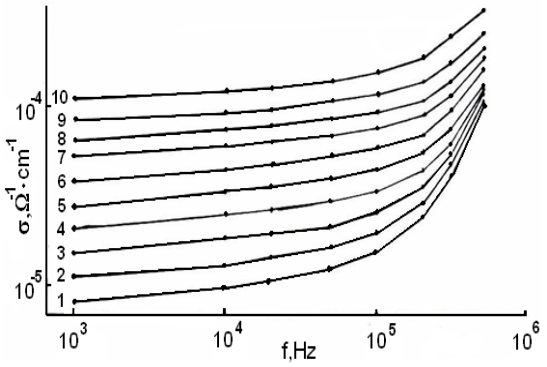
N.N.NIFTIYEV, O.B.TAĞIYEV*, Z.F.HACIYEVA, F.M.MƏMMƏDOV**

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti
AZ 1000, Bakı, Ü. Hacıbəyov, 34
*AMEA Fizika institutu**
AZ 1143, Bakı, H. Cavıd pr., 33
*AMEA Kımya Problemləri İnstitutu***
AZ 1143, H. Cavıd pr., 29

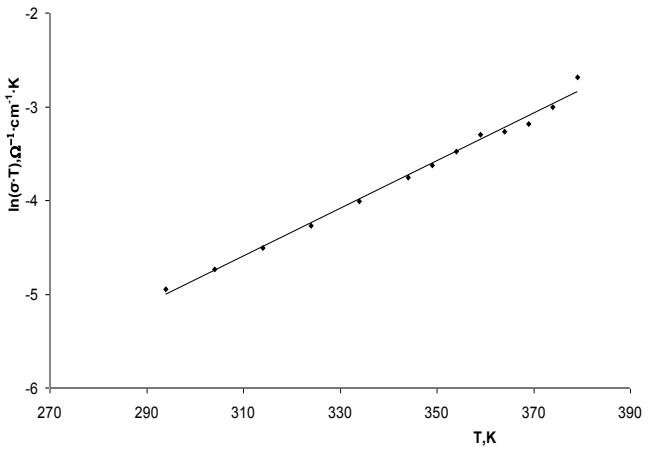
$FeGa_2S_4$ birləşməsinin müxtəlif tezlik və temperaturlarda elektrikkeçiriciliyi tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, elektrikkeçiriciliyi üçün 294÷376K temperatur və $10^4 \div 3\cdot10^5$Hz tezlik intervalında $\sigma \sim f^S$ $(0,1 \leq S \leq 1,0)$ qanunauyğunluğu ödənilir. $FeGa_2S_4$ kristalında elektrikkeçiriciliyinin tezlikdən asılı olaraq dəyişməsini multiplet modelinin köməyi ilə belə izah etmək olar ki, bu kristalda yaxın enerjili lokal hallardan ibarət klasterlər mövcuddur və elektronlar onların arasında sıçrayışla həyata keçirirlər.

Müasir yarımkeçiricilər elektronikasının funksional imkanlarını genişləndirən əsas mənbələrdən biri kimi AB_2X_4 (A- Mn, Fe, Co, Ni; B-Ga, In; X-S, Se, Te) tipli birləşmələri göstərmək olar. Artıq bu birləşmələr əsasında yeni fotohəssas şottki diodu [1-3] və heterokeçidlər [4] yaradılmışdır. Lakin, AB_2X_4 tipli birləşmələrin fiziki xassələrinin kompleks şəkildə tədqiqi və onların praktik tətbiq olunma imkanlarının tam öyrənilməsi həll edilməmişqalır. Qeyd edilən birləşmələr sinfinə aid olan $FeGa_2S_4$ – ün bəzi elektrofiziki xassələri [5-7] işlərində öyrənilmişdir. Hal-hazırkı işdə $FeGa_2S_4$ birləşməsinin dəyişən elektrik sahəsində elektrikkeçiriciliyinin tədqiqi nəticələri verilmişdir.

$FeGa_2S_4$ kristalı stexiometrik miqdarda yüksək təmizlikli (99,999%) elementlərdən alınmışdır. Rentqenoqrafik metodla analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, $FeGa_2S_4$ birləşməsi kristal qəfəs parametrləri a=12,89Å, b=7,51Å, c=6,09Å olan $ZnAl_2S_4$ tipli rombik quruluşamalik olur [5]. Elektrikkeçiriciliyini öyrənmək üçün qalınlığı ~ 0,5mm olan kristal lövhələrə gümüş pastası vuraraq kondensatorlar hazirlanmışdır. Kristallar 293÷400K temperatur intervalında tənzimlənə bilən kriostatda yerləşdirilmişdir. Temperatur ölçmələrinin dəqiqliyi ± 0,5K təşkil edir. Elektrik müqavimətinin ölçülməsi E7-20 ($25 \div 10^6$Hz) rəqəmli immetans ölçü cihazının köməyi ilə aparılmışdır. Nümunəyə 1V ölçmə gərginliyi verilmişdir.



Şəkil 1.
Müxtəlif temperaturlarda $FeGa_2S_4$ kristalının elektrik keçiriciliyinin elektrik sahə tezliyindən asılılığı.T,K: 1-294, 2-304, 3-314, 4-324, 5-334, 6-344, 7-354, 8-364, 9-374, 10-379.



Şəkil 2.
$FeGa_2S_4$ kristalı üçün $\ln(\sigma\cdot T) \sim f(T)$ asılılığı.

şəkil 1-də $FeGa_2S_4$ birləşməsinin elektrik keçiriciliyinin (σ) müxtəlif temperaturlarda tezlikdən (f) asılılıq qrafiki təsvir edilmişdir. σ (f) asılılığından görünür ki, başlanğıcda tezlik artdıqca elektrikkeçiriciliyi yavaş-yavaş artır, sonra isə 10^5 Hz tezlikdən başlayaraq σ daha sürətlə artmağa başlayır. $FeGa_2S_4$ kristalı üçün $10^4 \div 3\cdot10^5$Hz tezlik intervalında

$$\sigma \sim f^S \qquad (1)$$

qanunauyğunluğu özünü göstərir. 294K temperaturda $10^4 \div 3\cdot10^5$Hz tezlik intervalında S=0,17÷1,0 qiymətlərini alır. 379K temperaturda isə qeyd etdiyimiz tezlik intervalında S kəmiyyəti 0,1÷0,66 oblastında dəyişir. Göründüyü kimi, aşağı temperaturlarda S tezlikdən asılı olaraq daha çox dəyişir. Temperatur yüksəldikcə isə S tezlikdən asılı olaraq daha az dəyişir.

$FeGa_2S_4$ birləşməsində elektrikkeçiriciliyinin tezlikdən asılı olaraq artması mexanizmini aydınlaşdıraq. Məlumdur ki, kristal və amorf yarımkeçiricilərdə elektrikkeçiriciliyinin tezlikdən asılı olaraq dəyişməsi $\sigma(\omega) \sim \omega^S$, $0{,}01 \le S \le 1{,}0$ qanunu üzrə baş verərsə, bu zaman keçiricilikdə sıçrayış mexanizminin mövcud olması fərz edilir [8]. Keçiriciliyin tezlikdən asılılığının Debay analizinə əsaslanaraq keçiriciliyinin tezlik və temperaturdan asılılığının nəzəri tədqiqinə [9] işində baxılmışdır və orada keçiriciliyin tezlik asılılığı

$$\sigma(\omega)_T \sim \omega\{\ln(\frac{\nu_f}{\omega})\}^4 \sim \omega^S,\ S \le 1 \qquad (2)$$

kimi, σ - nin temperatur asılılığı isə

$$\sigma(T)_\omega \sim T^{-1} \exp(\frac{T}{T_o}) \qquad (3)$$

kimi müəyyən edilmişdir.

Burada ν_f – fononun tezliyi, T_o- xarakteristik temperaturdur. (3) ifadəsinə görə $T>T_o$ temperaturlarında elektrikkeçiriciliyinin temperaturdan asılılığı $\ln(\sigma\cdot T)\sim f(T)$ koordinatında düz xətt verməlidir. $FeGa_2S_4$ kristalında $\nu=2\cdot10^5$Hz tezliyində $\ln(\sigma\cdot T)\sim f(T)$ təcrübi asılılığı şəkil 2–də göstərilmişdir. şəkildən görünür ki, asılılıq düz xətt şəklindədir. Bu da keçiriciliyin sıçrayış mexanizminə uyğundur. Qeyd etmək lazımdır ki, AB_2X_4 tipli birləşmələr bir sıra xassələrə malikdirlər ki, (məs.çevirmə effekti, cərəyan dayanıqsızlığı və s.) bu da amorf cisimlər üçün xarakterikdir [10-11]. Həm də bu kristallar kompensə edilmiş yarımkeçiricilərdir [12-13]. Bu birləşmələrə qeyri nizamlı sistem kimi də baxmaq olar. Ona görə də $FeGa_2S_4$ kristalında sıçrayış keçiricilik mexanizminin olmasını qəbul etmək təbii haldır. AB_2X_4 tipli birləşmələrdə lokal səviyyələrin əmələ gəlmə səbəbləri aşağıdakı kimi ola bilər: 1) Kationların qarışıqlı yerdəyişməsi əsasında antiquruluş deffektlərin yaranması (A_B və B_A); 2) Stexiometrik boşluqların periodik yerləşməsinin pozulması; 3) Uzaq nizamlılığın pozulması; 4) Nəzarət edilməyən aşqarların mövcud olması. $FeGa_2S_4$ birləşməsində defektlərin yaranması antiquruluş defektlə əlaqədar olması ehtimalı azdır. Ona görə ki, Fe və Ga-un ion radiusları bir-birindən fərqlənir (R_{Fe}= 0,80Å; R_{Ga}=0,62Å). Bizə elə gəlir ki, $FeGa_2S_4$ birləşməsində defektlərin yaranması stexiometrik boşluqların periodik yerləşməsinin pozulması nəticəsində baş verə bilər. Qeyri nizamlı sistemlərdə sıçrayış keçiricilik probleminə bir sıra işlərdə klaster yaxınlaşması nöqteyi nəzərincə baxılmışdır [14-15]. Baxılan modeldə klasterlər yükdaşıyıcıların mümkün olan birləşməsindən yaranan müxtəlif uzunluqlu zəncirlər kimi özünü göstərir. Klaster ölçüsündə yükdaşıyıcıların hərəkəti E_S aktivləşmə enerjisinə malik aktivləşmiş sıçrayışlarla həyata keçirilir. Məlumdur ki, $FeGa_2S_4$ kristalının elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığı aktivləşmə xarakterinə malik olur [5]. Onun tezlikdən asılı olaraq dəyişməsini isə multiplit modelinin köməyi ilə izah etmək olar [16]. Belə ki, bu kristalda yaxın enerjili lokal hallardan ibarət klasterlər mövcud olur və elektronlar onların arasında sıçrayış həyata keçirirlər. Tezlik artdıqca elektrikkeçiriciliyin artması onunla izah olunur ki, tətbiq

olunan gərginliklərdə tezlik yüksəldikcə yükdaşıyıcılar dördə bir period ərzində lokallaşma yerinə çata bilmir və elektrik sahəsi fasiləsiz olaraq yüksəldikcə daha çox keçiricilik yaradır.

Beləliklə, $FeGa_2S_4$ birləşməsinin müxtəlif tezlik və temperaturlarda elektrikkeçiriciliyinin tədqiqi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, σ - nin tezlikdən asılı olaraq dəyişməsi $\sigma \sim f^S$ qanunu ilə baş verir və elektrikkeçiricilikdə sıçrayışmexanizmi əsas rol oynayır.

1. И.В.Боднарь, В.Ю.Рудь, Ю.В.Рудь, *ФТП,* **43** (2009) 1549
2. И.В.Боднарь, С.А.Павлюковец, В.Ю.Рудь, Ю.В.Рудь, *ФТП,* **43** (2009) 1553
3. И.В.Боднарь, В.Ю.Рудь, Ю.В.Рудь, Е.И.Теруков, *ФТП,* **44** (2010) 39
4. З.Д.Ковалюк, В.И.Катеринчук, В.В.Нетяга, А.В.Заслонкин, *Технология и конструирование в электронной аппаратуре,* **5** (2007) 43
5. N.N.Niftiyev, M.A.Alidzhanov, O.B.Taqiev, M.B. Muradov, F.M. Mamedov, *Ukr. J. Phys.,* **49** (2005) 34
6. N.N.Niftiyev, O.B.Tağiev, F.M.Məmmədov, *Fizika,* **XI** (2005) 34
7. N.N.Niftiyev, O.B.Tağiev, F.M.Məmmədov, M.B.Muradov, T.ġ.Həşimova, , *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXVII** №5 (2007) 84
8. Н.Мотт, Э.Дэвис, *Электронные процессы в некристаллических веществах, М., Мир* (1982) 662
9. Л.И.Рабкин, *Высокочастотные ферромагнетики, М, Высшая школа,* (1960) 143.
10. Н.Н.Нифтиев, М.А.Алиджанов, О.Б.Тагиев, М.Б.Мурадов, *Украйн. физ. журн,* **47** (2002) 1054.
11. Н.Н.Нифтиев, М.А.Алиджанов, О.Б.Тагиев, М.Б.Мурадов, *ФТП,* **38** (2004) 550.
12. Н.Н.Нифтиев, *ФТП,* **38** (2004) 522.
13. Н.Н.Нифтиев, *ФТП,* **38** (2004) 166.
14. H.Bettger, V.V.Bruksin, *Phys. stat. sol. (b),* **113** (1982) 9
15. Б.И.Шкловский, А.Л.Эфрос, *Электроннst свойства легированных полупроводников, Наука, М.,* (1979) 416.
16. В.В.Брыскин, *ФТТ,* **22** (1980) 2441.

ELECTROCONDUCTIVITY OF $FeGa_2S_4$ IN ALTERNATING ELECTRIC FIELD

N.N.NIFTIYEV, O.B.TAGHIYEV, Z.F.HAJIYEVA, F.M.MAMMADOV

The results of electroconductivity of $FeGa_2S_4$ under various frequency and temperature ranges have been presented. It has been established that $\sigma \sim f^S$ regularity ($0,1 \leq S \leq 1,0$) has been accomplished for electroconductivity within the temperature interval 29÷ 376K under frequency $10^4 \div 3 \cdot 10^5$Hz. Electroconductivity change in $FeGa_2S_4$ crystal depending on frequency may be explained using a multiplet model as there are clusters containing localized states with close energy in crystals and electrons jump occurs among them.

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ $FeGa_2S_4$ В ПЕРЕМЕННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Н.Н.НИФТИЕВ, О.Б.ТАГИЕВ, З.Ф.ГАДЖИЕВА, Ф.М.МАМЕДОВ

Приводятся результаты исследования электропроводности $FeGa_2S_4$ при различных частотах и температурах. Установлено, что в температурном интервале 294÷376К при частотах $10^4 \div 3 \cdot 10^5$Гц для электропроводности выполняется закономерность $\sigma \sim f^S$ ($0,1 \leq S \leq 1,0$). В кристалле $FeGa_2S_4$ изменение электропроводности в зависимости от частоты можно объяснить на основе мултиплетной модели, так как в кристаллах существуют кластеры, содержащие локализованные состояния с близкой энергией, между которыми осуществляется перескок электронов.

Редактор: Дж.Абдинов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

FİBROİN LİFİN DAXİLİNƏ FİZETİN MOLEKULLARININ DİFFUZİYASININ BİRİNCİ VƏ İKİNCİ MƏRHƏLƏSİ

Y.H.ŞÜKÜRLÜ

Azərbaycan MEA Şəki Regional Elmi mərkəz
AZ 5500, Şəki, L.Abdullayev, 24;
Azərbaycan Müəllimlər İnstitutunun Səki filialı
AZ 5500, Şəki ş., M.Ə.Rəsulzadə pr., 305

Təbii ipəyin - fibroin lifin, boyanması prosesində lifin boyaq məhlulu ilə təmas anından başlayaraq, fizetin piqmenti molekullarının fibroin lifin bütün həcmində bərabər paylanmasına qədər gedən diffuziya hadisəsi üç mərhələyə ayrılmış və araşdırılmışdır. Fizetin molekullarının fibroin lifin mərkəzinə çatana qədər davam edən diffuzuya hadisəsinin birinci və ikinci mərhələsi birlikdə tədqiq edilmiş və həmin mərhələlər üçün diffuziya prosesinin kinetikasını ifadə edən tənlik çıxarılmışdır. Güman olunur ki, həmin tənlik təbii ipək istehsalı sənayesinin boyaq-bəzək istehsalatı üşün xüsusi əhəmiyyət kəsb edəcəkdir.

GİRİŞ

Məlumdur ki, təbii ipək məmulatlarının süni boyaq maddələri ilə deyil, təbii boyaq maddələri ilə rənglənməsi daha məqsədyönlüdür. Çünki çox baha başa gələn və insan sağlamlığı üçün əvəzsiz olan təbii ipəyin süni boyaqla rənglənməsi, maya dəyərcə sərfəli olmasına baxmayaraq, gigenik cəhətdən qüsurludur.

Təbii ipək, tut ipəkqurdunun baramasından açılır. Baramanın, əsasən, 70-80%-ini fibroin lif (quruluş zülalıdır [1]), və 20-30%-ini yapışqan rolu oynayan seritsin (quruluş zülalıdır [1]), təşkil edir. Təbii ipəyin emalı prosesində seritsin, demək olar ki, tamamilə lifin tərkibindən çıxarılır və istehlaka verilən təbii ipək saf fibroindən ibarət olur.

Təbii ipəyin emalı prosesində boyama işi ən çətin mərhələ hesab olunur. Belə ki, fibroin mikrofibrili hissə-hissə kristallaşmış quruluşa malikdir. Mikrofibrilin kristalcıqlarının qeyri-hamar səthləti arasında fibroinin amorf hissələri yerləşir və boyaq maddəsinin molekulları təkcə amorf hissələrə deyil, həm də kristalcıqların səthlərinə adsorbsiya edir. Ona görə, elə şərait yaratmaq lazımdır ki, boyaq molekullarının fibroin lifə diffuziyasına səbəb olan səth qüvvələrinin təsiri ilə lifin bütün xarici və daxili fəzasında boyaq molekullarının bərabər paylanması təmin olunsun.

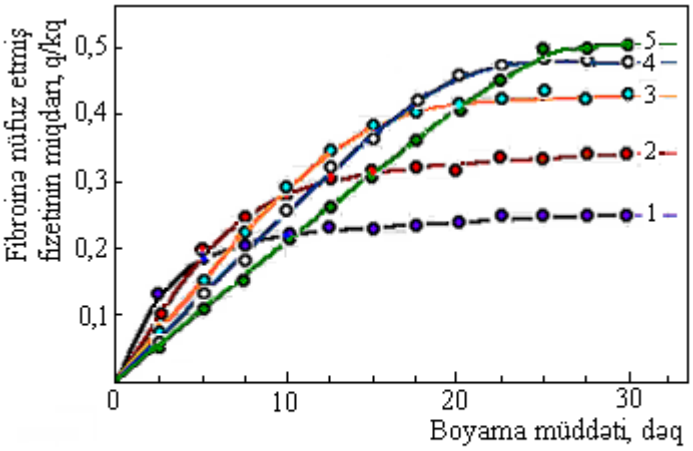
Təbii və süni liflərin bərabər tonda boyanması bir çox amillərdən: lifin ifrat-molekulrar quruluşundan, boyaq məlulunun temperaturundan, molekullarının konsentrasiyasından, *pH*-ından, seçilmiş elektrolitin növü və miqdarından və s. asılı olur. Ona görə, fibroin lifin rəngənməsi kimi mürəkkəb prosesin kinetikasının qurulması Yüngül sənayenin müvafiq sahəsi üçün aktual məsələdir. İki hissədən ibarət olan bu məqalədə məqsəd, məhluldakı boyaq molekullarının konsentrasiyasından asılı olaraq, fibrion lifə fizetin (sarı rəngli flavonol [2]) molekullarının diffuziyası prosesinin kinetikasının qurulmasıdır.

TƏCRÜBİ HİSSƏ

Məhluldakı boyaq molekullarının konsentrasiyasından asılı olaraq, fibrion lifə fizetin molekullarının diffuziyası prosesinin kinetikasının qurulması məqsədi ilə 4 litr distillə suyunda 20q fizetinin həll edilmiş və 5q/litr konsentrasiyalı NaCl (elektrolit) məhlul hazırlanmışdır. Kənar qarışıqlardan diqqətlə təmizlənmiş və sabit kütləyədək qurudulmuş 100q fibroin, hazırlanmış bu boyaq məhluluna salınmış və, mütəmadi qarışdırılmaqla, 293, 313, 333, 353, və 373K temperaturlu məhlullarda ölçmələr aparılmışdır. Nümunələr fibroin salınmış və diffuziya davam edən flavonol məhlulundan hər 150 saniyədən bir 10ml sınaq məhlulu götürülmüş, kolorimetrdə, 313,3nm dalğa uzunluqlu işıq süzgəcindən keçən işıq şüası ilə, təcrübənin bu mərhələsində məhlulun optik sıxlığı, buna müvafiq olaraq da məhlulda qalan fizetin molekullarının

konsentrasiyası təyin edilmişdir [3]. Optik sıxlığa görə konsentrasiyanı təyin etməsi üçün kalibrləmə qrafiki qurularaq istifadə olunmuşdur. Şək. 1-də verilən və fibroin lifə fizetin molekullarının diffuzuyası prosesinin məhlulun temperaturundan və boyama müddətindən asılılığı qrafiklərin qurulan zaman nəzərdə tutulmuşdur ki, diffuziya prosesində məhluldakı fizetin molekullarının azalması, onların fibroin lifə nüfuz etməsi ilə əlaqədardır.

Göründüyü kimi, məhlulun temperaturu artdığı halda fizetin molekullarının fibroin lifə daxil olması sürəti azalır və doyma halının alınmasına sərf olunan müddət uzanır. 203K temperaturda fifetin molekulları ilə fibroin lif arasında termodinamik tarazılığın yaranması ~10 dəqiqəyə baş verdiyi halda, 373K temperaturda bu tarazılığın alınması üçün ~30 dəqiqə vaxt tələb olunur. Lakin birinci halda fibroin lifin fizetin molekulları ilə doyması – termodinamik tarazılığın yaranması halında fibroinin hər kiloqramına ~0,2q fizetin, ikinci halda isə ~0,5q fizetin daxil olur. Məlumdur ki, rənginin intensivliyi məmulata vurulan boyaq maddəsinin miqdarından asılıdır. Temperaturun yüksəlməsi isə məmulatın istehlak keyfiyyətini aşağı salır. Deməli, başqa məmularlarda olduğu kimi, fibroin üçün də hər bir boyama prosesinin optimal rejimini təyin etməyə ehtiyac var [3].



Şəkil 1.
Fibroin lifə fizetin molekullarının diffuziyası prosesinin məhlulun temperaturundan və boyama müddətindən asılılığı: 1 - 303K; 2 -313K; 3 - 333K; 4 - 353K; 5 - 373K.

ALINMIŞ NƏTİCƏLƏRİN TƏHLİLİ

Fibroin lif ilə boyaq məhlulundakı fizetin molekullarının təmasa başladığı andan, lifin bütün həcmində bərabər paylanmasına qədər, keçən müddət ərzində diffuziyanın kinetikasını təsvir etmək üçün O.B.Vinoqradova və b. üçmərhələli modelindən [4] istifadə edildi və birinci və ikinci mərhələ birlikdə, üçüncü mərhələ ayrılıqda öyrənildi. Birinci və ikinci mərhələlərin birləşdirilməsi onunla əlaqədardır ki, lif ilə məhlulun təmas anından diffuziya prosesinin birinci mərhələsi – adsorbsiya, başlayır. Apardığımız təcrübələr göstərdi ki, fizetin molekullarının fibroin lifə adsorbsiyası, praktiki olaraq, ani müddətdə baş verir [5]. Yəni, real diffuziya prosesi tədqiq edildikdə adsorbsiya ilə diffuziyanın ikinci - flavonol molekullarının lifin mərkəzinə çatmasına qədərki - mərhələsini bir-birindən ayirmaq mümkün deyil.

Məlumdur ki, boyaq məhlulunda boyaq molekulların konsentrasiyası çox olan hissədən az olan hissəyə nüfuz etməsi (diffuziya) ilə kütlə daşınması baş verir [5]. Boyaq məhluluna salınmış fibroin lifə fizetin molekulların nüfuz etməsi, konsentrasiya qradienti mövcud olduğu müddətdə, uç istiqamətdə (x,y,z) baş verir. Biz isə, diffuziya məsələsinin həllini asanlaşdırmaq məqsədi ilə, konsentrasiya qradientinin yalnız bir istiqamətdə (x-istiqamətində) mövcud olduğunu fərz edirik və bu yaxınlaşma imkan verir ki, üçölçülü diffuziya məsələsi birölçülü məsələyə gətirilsin.

Diffuziya hadisəsini xarakterizə edən Fik qanunununa görə, maddənin konsentrasiyasının dəyişməsi istiqamətinə normal yerləşən ΔS səthindən Δt zaman fasiləsində daşınan maddənin ΔQ miqdarı, ΔS səthinin sahəsi, maddənin $\frac{dC}{dx}$ konsentrasiya qradienti və Δt zaman müddəti ilə düz proporsionaldır:

$$\Delta Q = -D\left(\frac{dC}{dx}\right)_T \Delta S \Delta t\,, \qquad (1)$$

burada D – diffuzuiya əmsalı, $-D\left(\frac{dC}{dx}\right)_T$ diffuziya edən maddə selinin sıxlığı - yəni vahid zamanda vahid səthdən keşən maddə miqdarını ifadə edir. Maddə seli sıxlığını J ilə işarə edək

$$J = -D\left(\frac{dC}{dx}\right)_T. \qquad (1a)$$

(1) və (1a) ifadələrində D - diffuziya əmsalı, tədqiq olunan prosesdə daşınan boyaq molekulların irəliləmə hərəkətinin orta surəti $\overline{u}$ və molekulların sərbəst qaçış yolunun orta uzunluğu $\overline{\lambda}$ ilə düz proporsional kəmiyyətdir:

$$D = \frac{1}{3}\overline{u}\cdot\overline{\lambda}\,. \qquad (1b)$$

(1b) ifadəsini (1a)-da nəzərə alsaq

$$J = -\frac{\overline{u}\cdot\overline{\lambda}}{3}\left(\frac{dC}{dx}\right)_T. \qquad (2)$$

Aydındır ki, (1a) ifadəsini (1)-də nəzərə almaqla, çox kiçik Δt zaman fasiləsində $(\Delta t \to 0)$ lifin vahid uzunluğuna düşən S yan səthindən lifin daxilinə nüfuz edən fizetinin maddəsinin miqdarını hesablaya bilərik:

$$dQ = JSm_0 dt\,, \qquad (3)$$

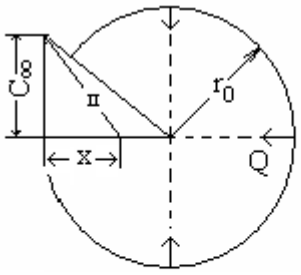
burada m_0 – bir fizetin molekulunun kütləsidir. J-nin (1a)-dakı ifadəsini (3) ifadəsində yerinə yazsaq, alarıq

$$dQ = -D\left(\frac{dC}{dx}\right)_T Sm_0 dt\,. \qquad (4)$$

(4) ifadəsindən fizetin molekullarının fibroin lifə diffuziyası hadisəsini tədqiq etmək üçün istifadə edək. Bunun üçün də fərz edək ki, lifin daxilində fizetin molekulların konsentrasiyası xətti paylanır və bu da imkan verir ki, aşağıdakı bərabərliyi yazaq:

$$\frac{dC}{dx} = \frac{C_\infty}{x}\,. \qquad (5)$$

Sonuncu ifadədəki C_∞ - birinci mərhələnin (adsorbsiya prosesinin) sona gəldiyi və ikinci mərhələnin başladığı anda lifin səth təbəqəsində yaranan konsentrasiyadır.



Şəkil 2.
Diffuzuyanın birinci və ikinci mərhələsində fizetin molekullarının fibroin lifin həcmində paylanma modeli.

Biz də fibroin lifə fizetin molekullarının diffuziyası prosesini araşdırılmasında boyaq maddəsinin məhluldan lifə diffuziyasının öyrənilməsi üçün, şək. 2-də təsvir olunmuş dioqramdan istifadə etmişik. Həmin dioqramda vahid uzunluqlu lifin en kəsiyi götürülür və lifin daxilində gedən diffuziya prosesi konsentrasiya miqyası ilə təsvir olunur. Bu halda lifin vahid uzunluqlu hissəsinin fizetin ilə təmasda olan yan səthinin sahəsi: $S = 2\pi\cdot r_0$, həmin hissənin həcmi: $\pi\cdot r_0^2$, və bu həcmə daşınaraq, dt müddətində konsentrasiyanın dC_t^{II} dəyişdəsinə səbəb olan molekulların sayı $\pi\cdot r_0^2\, dC_t^{II}$-yə bərabərdir. Deməli, vahid uzunluqlu lifin mərkəzinə doğru yönəlmiş x istiqamətində daşınan kütlə bərabərdir:

$$dQ_x = \pi \cdot r_0^2 m_0 dC_t^{II}. \qquad (5a)$$

dQ_x-nun bu ifadəsini (4) tənliyində yerinə yazaq və $\frac{dC}{dx}$ qradientinin əvəzinə $\frac{C_\infty}{x}$ nisbəti götürək ((5) ifadəsinə görə):

$$\pi \cdot r_0^2 m_0 dC_t^{II} = -D\frac{C_\infty}{x} 2\pi \cdot r_0\, m_0 dt.$$

Buradan

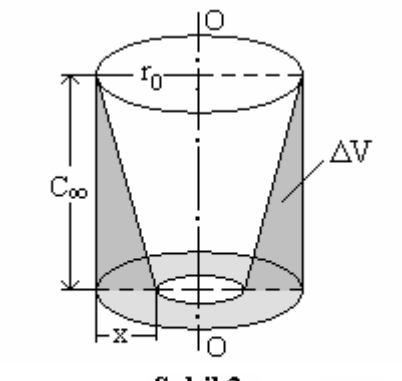
$$\frac{dC_t^{II}}{C_\infty} = \frac{2}{x} \cdot \frac{D}{r_0} dt. \qquad (6)$$

Aldığımız bu sonuncu diferensial tənlik lifə nüfuz edən molekullarının konsentrasiya dəyişməsini zamandan asılılığını ifadə edir və bu tənliyi həll etmək üçün, əvvəlcə, (5a)-nı inteqrallayaq:

$$Q_x = \pi \cdot r_0^2 m_0 C_t^{II} + c_1,$$

harada ki, c_1 – inteqrallama sabitidir. Başlanğıc şərt kimi, lifi fizetin məhluluna salan anda (t=0) lifin daxilində fizetin maddəsinin olmadığı qəbul etsək:

$$c_1 = 0.$$



Şəkil 3.
Diffuziyanın ikinci mərhələsində diffuziya prosesinin həcm modeli.

Deməli,

$$Q_x = \pi \cdot r_0^2 m_0 C_t^{II}. \qquad (5b)$$

Sonra isə, şək. 3-də göstərilən modelindən istifadə edək. Həmin modeldəki tünd rəngli ΔV həcmi ikinci mərhələdə lifin mərkəzinə doğru (x istiqamətində) hərəkət edən boyaq molekullarının konsentrasiyanın x-dən asılı olaraq dəyişməsini ifadə edir. Ona görə, əvvəlcə, tünd rəngli fiqurun həcmini hesablayaq:

$$\Delta V = V_{\text{silindr}} - V_{\text{k.kon.}} = \pi \cdot C_\infty \left(r_0 x - \frac{x^2}{3} \right).$$

ΔV-nin bu qiymətinin fizetin molekulunun kütləsi m_0-a hasili isə lifin vahid uzunluğuna nüfuz etmiş fizetin maddəsinin kütləsini verir

$$Q_x = \pi \cdot C_\infty m_0 \left(r_0 x - \frac{x^2}{3} \right). \qquad (5c)$$

(5b) ilə (5c)-ni müqayisə etsək alarıq

$$\pi \cdot r_0^2 m_0 C_t^{II} = \pi \cdot C_\infty m_0 \left(r_0 x - \frac{x^2}{3} \right).$$

Buradan da alınır ki

$$r_0^2 C_t^{II} = C_\infty \left(r_0 x - \frac{x^2}{3} \right), \text{ yaxud } C_\infty x^2 - 3C_\infty r_0 x + 3C_t^{II} r_0^2 = 0. \qquad (7)$$

$C_\infty \geq C_t^{II}$ olduğundan, (7) kvadrat tənliyin iki həqiqi kökü vardır

$$x_{1,2} = 1{,}5 r_0 \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{4}{3} \cdot \frac{C_t^{II}}{C_\infty}} \right).$$

Digər tərəfdən, $x \leq r_0$-dir. Ona görə (7) tənliyinin

$$x = 1{,}5 r_0 \left(1 - \sqrt{1 - \frac{4}{3} \cdot \frac{C_t^{II}}{C_\infty}} \right) \qquad (8)$$

həllini götürürük. Diffuziya məsafəsi x-in (8) ifadəsini (6)-da nəzərə alsaq, yaza bilərik:

$$\frac{dC_t^{II}}{C_\infty}=\frac{4}{3\left(1-\sqrt{1-\frac{4}{3}\cdot\frac{C_t^{II}}{C_\infty}}\right)}\cdot\frac{D}{r_0^2}dt,\ \text{yaxud}\ \left(1-\sqrt{1-\frac{4}{3}\cdot\frac{C_t^{II}}{C_\infty}}\right)\frac{dC_t^{II}}{C_\infty}=\frac{4}{3}\cdot\frac{D}{r_0^2}dt.$$

Sonuncu ifadə inteqrallandıqdan sonra alınır ki

$$\sqrt{\left(1-\frac{4}{3}\cdot\frac{C_t^{II}}{C_\infty}\right)^3}+2\frac{C_t^{II}}{C_\infty}=\frac{8}{3}\frac{D}{r_0^2}t+c_2. \tag{9}$$

(9) ifadəsindəki inteqral sabiti c_2-ni təyin etmək üçün sərhəd şərtlərindən istifadə edək. İkinci mərhələnin başlanğic anı birinci mərhələnin başa çatdığı t_I anı ilə eyni və həmin an üçün $t_{II}=0$ olduğunu nəzərə alaq. $t_{II}=0$ anı üçün $\frac{C_t^{II}}{C_\infty}$ nisbətini $\frac{C_t^{I}}{C_\infty}$ kimi yaza bilərik. Yəni

$$\frac{C_t^{II}}{C_\infty}=\frac{C_t^{I}}{C_\infty}. \tag{9a}$$

(9a) bərabərliyini (9) da nəzərə alaq və c_2-ni təyin edək:

$$c_2=\sqrt{\left(1-\frac{4}{3}\cdot\frac{C_I}{C_\infty}\right)^3}+2\frac{C_t^{I}}{C_\infty},$$

harada ki, C_t^{I} – diffuziya prosesinin birinci mərhələsinin sonunda lifdəki boyaq maddəsinin konsentrasiyasıdır. Əgər c_2-nin bu ifadəsini (9)-da nəzərə alsaq, tənlik aşağıdakı şəklə düşər:

$$\sqrt{\left(1-\frac{4}{3}\cdot\frac{C_t^{II}}{C_\infty}\right)^3}+2\frac{C_t^{II}}{C_\infty}=\frac{8}{3}\frac{D}{r_0^2}t+\sqrt{\left(1-\frac{4}{3}\cdot\frac{C_t^{I}}{C_\infty}\right)^3}+2\frac{C_t^{I}}{C_\infty}. \tag{10}$$

(10) bərabərliyi C_t^{II}-nin t-dən aslılığını ifadə edən kub tənlikdir. Əgər $\frac{C_t^{II}}{C_\infty}=\alpha$; $\frac{D}{r_0^2}t=\beta$ və $\sqrt{\left(1-\frac{4}{3}\cdot\frac{C_t^{I}}{C_\infty}\right)^3}+2\frac{C_t^{I}}{C_\infty}=\chi$ əvəzləmələri etsək, tənlik aşağıdakı şəklə düşür:

$$\sqrt{\left(1-\frac{4}{3}\cdot\alpha\right)^3}+2\alpha=\frac{8}{3}\beta+\chi. \tag{11}$$

Bu tənliyi kanonik şəkildə yazaq:

$$\alpha^3-\frac{9}{16}\alpha^2+\frac{27}{16}\left(1-\frac{8}{3}\cdot\beta-\chi\right)\alpha+\left(3\beta^2+\frac{9}{4}\beta\chi+\frac{27}{64}\chi^2-\frac{27}{64}\right)=0. \tag{12}$$

Tənliyi bir qədər də sadələşdirmək üçün yada salaq ki, adsorbsiya prosesində lifin səthində C_∞-nin qərarlaşması, praktiki olaraq, ani baş verir. Ona görə, $t_I\cong 0$ və, buna müvafiq olaraq, $C_t^{I}\cong 0$ götürə bilirik. Bu halda, $\chi=1$ olur. Beləliklə, (12) tənliyində $a=-\frac{9}{16}$; $b=\frac{27}{16}\left(1-\frac{8}{3}\beta\right)$ və $c=3\beta^2+\frac{9}{4}\beta$ əvəzləmələri edildikdən sonra, tənlik aşağıdakı şəklə düşür:

$$\alpha^3+a\alpha^2+b\alpha+c=0, \tag{12a}$$

Məlumdur ki, (12a) kub tənliyinin həqiqi köklərinin tapılması üçün müxtəlif müəlliflərin təklif etdikləri üsullsrdan istifadə etmək olar. Əgər Viet-Kardano üsulundan istifadə etsək, əvvəlcə həqiqi əmsalları hesablamalıyıq [http://cubic-solver.info/]

$$Y = \left(a^2 - 3b\right)/9\,; \quad Z = \left(2a^2 - 9ab + 27c\right)/54\,.$$

Y və *Z*-in qiymətlərini tapdıqdan sonra, bu iki ifadəni müqayisə ediruk. Verilən hal üçün

$$Z^2 \geq Y^3$$

olduğundan (12a) tənliyinin bir həqiqi və iki qoşma kompleks kökü (cırlaşmış halda) olmalıdır. Bizi maraqlandıran bu tənliyin həqiqi köküdür və həmin kökü yazmaq üçün aşağıdakı əmsalları daxil etmək lazım gəlir:

$$A = -sign(Z)\left[|Z| + sqrt\left(Z^2 - Y^3\right)\right]^{\frac{1}{3}},\ B = Y/A.$$

Burada *sqrt* kvadrat kökü verir, *sign*(Z) isə belə təyin olunur: $sign(Z) = \begin{cases} 1,\ Z > 0 - \text{üçün}, \\ 0, Z = 0 - \text{üçün}, \\ -1, Z < 0 - \text{üçün}. \end{cases}$.

Əgər $A! = 0$ olsa, $B = Y/A$; əgər $A = 0$ olsa, $B = 0$ olacaqdır.

Viet-Kardano üsulundan istifadə etməklə, *A* və *B* əmsalları ilə alınan həqiqi kök α_1 aşağıdakı kimi yaza bilərik:

$$\alpha_1 = (A + B) - \frac{a}{3}.$$

A və *B* əmsallarının yuxarıdakı qiymətlərini və $\alpha_1 = \dfrac{C_t^{II}}{C_\infty}$ olduğunu nəzərə alsaq və $\delta = 60^o + \frac{1}{3} arcCos \frac{3}{2}\left(\frac{D}{r_0^2}t\right)^2 + \frac{45}{60}\left(\frac{D}{r_0^2}t\right) - \frac{27}{4096} / \sqrt{\left(\frac{3}{2}\cdot\frac{D}{r_0^2}t + \frac{9}{256}\right)^3}$ əvəzləməsini etsək, alarıq:

$$\frac{C_t^{II}}{C_\infty} = 2\sqrt{\frac{3}{2}\cdot\frac{D}{r_0^2}t + \frac{9}{256}}\cdot Cos\delta + \frac{3}{16}. \qquad (13)$$

Beləliklə, alınmış (13) ifadəsi fizetin molekullarının fibroin lifə diffuziyası prosesinin birinci və ikinci mərhələsinin kinetik tənliyini almış olduq. Güman edirik ki, həmin tənlik təbii ipək istehsalı sənayesinin boyaq-bəzək istehsalatı məşğul olan bir çox mütəxəssis üçün xüsusi əhəmiyyət kəsb edəcəkdir.

1. Э.Б.Рубинов, *Технология шелка (кокономотания): Учебник для вузов. М.: Легк. и пищев. промыш.,* (1981) 392.
2. В.П.Георгиевский, Н.Ф.Комисаренко, С.Е.Дмитрук, *Биологически активные вещества лекарственных растений. Новосибирск: Наука,* (1990) 101.
3. Ю.Г.Шукюрлу *Структурные белки. Баку: «Элм»,* (2006) 282.
4. О.Б.Виноградова, Б.М.Лякшиев, Б.Н.Мельников, *Технол. текстил. пром.*, № 1, (1973) 75.
5. Ю.Г.Фролов, *Курс коллоидной химии. Поверхностные явления и дисперсные системы. М.: Химия,* (1989) 464.

THE FIRST AND SECOND STAGE OF PROCESS OF DIFFUSIONS IN THE THREADS OF THE FIBROIN OF THE MOLECULE OF FISETIN

Y. H. SHUKURLU

The process of diffusion dye - pigment phizetin, into the fibrous fibroin, starting from the time of contacting, till the steady distribute dye throughout the all volume of yarn has been investigated upon 3 stages. The first and second stage has been formulated with the help of mathematical model describing the kinetics diffusion of molecule of phizetin to the thread of fibroin.

ПЕРВЫЙ И ВТОРОЙ ЭТАП ДИФФУЗИИ В ФИБРОИНОВЫХ НИТИ ФИЗЕТИНОВЫЙ МОЛЕКУЛОЙ

Ю.Г.ШУКЮРЛУ

Процесс диффузии молекулы физетина (пигмента) в волокне фиброина, начиная с момента установления контактов до стабильного распределения красителя во всем объеме пряжи, был исследован в три этапа. Первый и второй этап был разработан с помощью математической модели, описывающей кинетику диффузии молекулы физетина к нити фиброина, получена соответствующая формула. Эта формула дает возможность определить кинетику диффузии молекулы физетина до подхода его молекулы к центру волокна фиброина.

Редактор: Н.Ахмедов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

QEYRİ-MÜNTƏZƏM DİVARLI İFRAT YÜKSƏK TEZLİKLİ DÜZBUCAQLI DALĞAÖTÜRƏNİN SƏTHİ İMPENDASININ RİYAZİ MODELİ

R.C.RƏSULOV

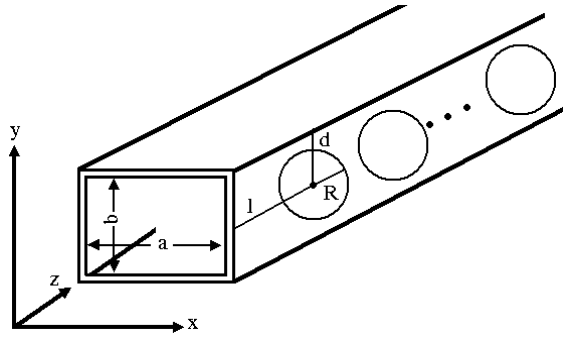
Azərbaycan Texniki Universiteti
AZ 1073, Bakı, H.Cavid prospekti, 25

Divarı qeyri-müntəzəm olan düzbucaqlı dalğaötürənin səthi impendası üçün riyazi model işlənmişdir. Alınmış riyazi modelin köməyilə istənilən dəqiqlik dərəcəsilə belə dalğaötürənin səthi müqaviməti təyin etmək olar.Göstərilmişdir ki,səthi müqavimətin təyini üsulundan mürəkkəb sistemlərin tədqiqi üçün istifadə oluna bilər.

Mürəkkəb dalğaötürən traktların müxtəlif ölçülü deşiklər açılmaqla bir-birilə əlaqələndirilməsi hazırda ifrat yüksək tezlikli texnikada geniş tətbiq olunur [1]. Belə qurğularda müxtəlif dalğaötürənlər və əlaqə (rabitə) deşikləri olduğundan onların elektrik xarakteristikalarını hesablamaq kifayət qədər mürəkkəb məsələdir. Ona görə də dar divarı qeyri-müntəzəm olan düzbucaqlı dalğaötürənlərin səthi impendansının parametrlərinin riyazi modelini qurmaq aktuallığı ilə yanaşı eyni zamanda böyük təcrübi əhəmiyyət kəsb edir.

Bunun üçün riyazi aparat kimi difraksiya və radiodalğaların yayılması məsələlərində geniş tətbiq olunan impendans üsulundan [2,3] istifadə etmək daha əlverişlidir.

Rabitə üçün dar divarının üzərində deşik açılan düzbucaqlı dalğaötürən tədqiq olunan qurğudur (şək.1). Açılan deşiyə diametri bu deşiyin diametrinə bərabər olan dairəvi dalğaötürənlər birləşdirilmişdir. Düzbucaqlı dalğaötürəndə əsas tip dalğa H_{10} dalğasıdır.



Aşağıdakı işarələmələri qəbul edək: a-dalğaötürənin geniş divarının ölçüsü; b-dalğaötürənin dar divarının ölçüsü; d-y oxu boyunca koordinat başlanğıcından deşiyin mərkəzinə qədər olan məsafə; l-z oxu boyunca koordinat başlanğıcından deşiyin mərkəzinə qədər olan məsafə; h- strukturun periodu.

Şək.1.
Dar divarı qeyri-müntəzəm olan düzbucaqlı dalğaötürən.

şək.1-dən göründüyü kimi dalğaötürənin dar divarındakı səthi impendansın qiyməti səthi deşiklərindən başqa digər yerlərdə sıfıra bərabərdir. Qəbul edək ki, səthi impendans birləşdirilmiş dairəvi dalğaötürənlərin dalğa müqavimətləri ilə üst-üstə düşür YOZ müstəvisində səthi impendansı ikiqat Furye sırasına ayıraq [4]:

$$Z_s(y,z)=\sum_{m=0}^{\infty}\sum_{n=0}^{\infty}\omega_{mn}(a_{mn}\cos\alpha_y y\cdot\cos\alpha_z z+b_{mn}\sin\alpha_y y\cdot\cos\alpha_z z+c_{mn}\cos\alpha_y y\cdot\sin\alpha_z z+$$
$$+d_{mn}\sin\alpha_y y\cdot\sin\alpha_z z), \qquad (1)$$

burada ω_{mn} aşağıdakı bərabərliklə təyin edilir

$$\omega_{mn}=\begin{cases}\frac{1}{4}, m=0, n=0\\ \frac{1}{2}, m>0, n<0\\ 1, m>0, n>0; m<0, n>0\end{cases} \qquad (2)$$

$\alpha_y = \frac{m\pi}{b}, \alpha_z = \frac{n\pi}{h}$ -uyğun olaraq y və z oxları boyunca eninə dalğa ədədləridir.

Nəzərə alsaq ki, düzbucaqlı dalğaötürəndə əsas tip dalğa H_{10} dalğasıdır, onda səthi impendans y oxu boyunca cüt funksiya olacaqdır. Bu halda (1)- də b_{mn} , d_{mn} əmsalları sıfra bərabər olur. (1)- də a_{mn} ,c_{mn} məchul əmsallar aşağıdakı kimi təyin edilir.

$$a_{mn} = \frac{4}{bh}\iint_s Z_s \cos(\alpha_y y)\cos(\alpha_z z)dydz,$$
$$c_{mn} = \frac{4}{bh}\iint_s Z_s \cos(\alpha_y y)\sin(\alpha_z z)dydz. \quad (3)$$

Düzbucaqlı koordinat sistemi ilə silindirik koordinat sistemi arasındakı

$$z = l + \rho\cos\varphi,$$
$$y = d + \rho\sin\varphi, \quad (4)$$

əlaqələrindən istifadə etməklə (3)-də a_{mn} , c_{mn} əmsalları üçün riyazi ifadələri təyin edək.

Əvvəlcə a_{mn} əmsalının riyazi ifadəsinin təyininə baxaq.(4)-ü nəzərə almaqla a_{mn} üçün alarıq

$$a_{mn} = \frac{4}{bh}\int_0^R\int_0^{2\pi} Z_s \cos[\alpha_y(d+\rho\sin\varphi)]\cdot\cos[\alpha_z(l+\rho\cos\varphi)]\rho d\rho d\varphi. \quad (5)$$

(5)-də müəyyən çevirmələr aparmaqla aşağıdakı dörd inteqrallarını alarıq.

$$I_1 = \frac{4Z_s}{bh}\int_0^R\int_0^{2\pi}\cos(\alpha_y d)\cos(\alpha_y\rho\sin\varphi)\cdot\cos(\alpha_z l)\cos(\alpha_z\rho\cos\varphi)\rho d\rho d\varphi,$$
$$I_2 = \frac{4Z_s}{bh}\int_0^R\int_0^{2\pi}\cos(\alpha_y d)\cos(\alpha_y\rho\sin\varphi)\cdot\sin(\alpha_z l)\sin(\alpha_z\rho\cos\varphi)\rho d\rho d\varphi, \quad (6)$$
$$I_3 = \frac{4Z_s}{bh}\int_0^R\int_0^{2\pi}\sin(\alpha_y d)\sin(\alpha_y\rho\sin\varphi)\cdot\cos(\alpha_z l)\cos(\alpha_z\rho\cos\varphi)\rho d\rho d\varphi,$$
$$I_4 = \frac{4Z_s}{bh}\int_0^R\int_0^{2\pi}\sin(\alpha_y d)\sin(\alpha_y\rho\sin\varphi)\cdot\sin(\alpha_z l)\sin(\alpha_z\rho\cos\varphi)\rho d\rho d\varphi.$$

Ykobi –Anqer [5] düsturundan istifadə edək

$$e^{iz\sin\varphi} = \sum e^{in\varphi}J_n(z),$$
$$e^{iz\cos\varphi} = \sum i^n e^{in\varphi}J_n(z). \quad (7)$$

(7)-dən istifadə etməklə (6)-da I_1 inteqralının inteqralaltı ifadəsini aşağıdakı kimi göstərmək olar

$$I_1 = \frac{4Z_s}{bh}\cos(\alpha_y d)\cos(\alpha_z l)\int_0^R\int_0^{2\pi}[J_0(\alpha_y\rho) + 2\sum_{p=1} J_{2p}(\alpha_y\rho)\cos 2\rho\varphi]\cdot[J_0(\alpha_z\rho) +$$
$$+\sum(-1)^p J_{2p}(\alpha_z\rho)\cos 2\rho\varphi]\rho d\rho d\varphi. \quad (8)$$

(8)-də $\cos 2\rho\varphi$, $\cos(2\rho-1)\varphi$, $\sin 2\rho\varphi$, $\sin(2\rho-1)\varphi$ funksiyaları $0<\varphi<2\pi$ intervalında ortoqonaldır. Onların ortoqonallığını nəzərə alaraq I_1 inteqralını aşağıdakı kimi ifadə edək

$$I_1 = \frac{4Z_s}{bh}\cos(\alpha_y d)\cos(\alpha_z l)\int_0^R[\frac{1}{2}J_0(\alpha_y\rho)\cdot J_0(\alpha_z\rho) - J_2(\alpha_y\rho)J_2(\alpha_z\rho) + J_4(\alpha_y\rho)J_4(\alpha_z\rho) - ...]\rho d\rho \quad (9)$$

(9)-a daxil olan hər bir həddi aşağıdakı kimi göstərmək olar [5]

$$\int \rho J_p(i\rho)J_p(j\rho)d\rho = \frac{j\rho J_p(i\rho)J_{p-1}(j\rho) - i\rho J_{p-1}(i\rho)J_p(j\rho)}{i^2 - j^2}, \qquad (10)$$

burada p-(9) ifadəsinin inteqralaltı hədlərində Bessel funksiyasının dərəcəsinə uyğun olan indeksidir.

I_2 , I_3, I_4 inteqralları ilə yuxarıda göstərilən analoji çevirmələri aparsaq onların sıfıra bərabər olduğunu göstərmək olar.

Beləliklə, (3)-də a_{mn} əmsalı (9)-da I_1 inteqralının ifadəsi ilə üst-üstə düGür yəni $a_{мн}$=ЫI_1. ж$_{мн}$ əmsalı üçün isə alarıq

$$c_{mn} = \frac{4Z_s}{bh}\int_0^R\int_0^{2\pi} \cos[\alpha_y(d+\rho\sin\varphi)]\cdot\sin[\alpha_z(l+\rho\cos\varphi)]\rho d\rho d\varphi. \qquad (11)$$

a_{mn} əmsalının təyin edilməsində aparılan analoji çevirmənin aparsaq c_{mn} üçün aGağıdakı riyazi ifadəni alarıq

$$c_{mn} = \frac{4Z_s}{bh}\cos(\alpha_y d)\sin(\alpha_z l)\int_0^R [\frac{1}{2}J_0(\alpha_y\rho)J_0(\alpha_z\rho) - \\ - J_2(\alpha_y\rho)J_2(\alpha_z\rho) + J_4(\alpha_y\rho)J_4(\alpha_z\rho) - ...]\rho d\rho d\varphi. \qquad (12)$$

Səthi impendans üçün ifadəni aGağıdakı kimi göstərək

$$Z_s(y,z) = \sum_{p,r}\alpha_{pr}Z_{pr}\cos(\frac{p\pi y}{b})\cos\left[\frac{r\pi z}{h} + \varphi_r\right], \qquad (13)$$

burada $Z_{pr} = \sqrt{a_{pr}^2 + c_{pr}^2}; \varphi_r = \frac{r\pi d}{h}$; p, r-m və n indekslərinin dəyiGmə intervalına uyğun olan indekslərdir.

Z_{pr} üçün alınan ifadəyə a_{pr} və c_{pr} əmsalarının qiymətlərini yerinə yazsaq, alarıq

$$Z_{pr} = \frac{4Z_s}{bh}\cos(\frac{p\pi}{b}d)\sum_{p=0}^{\infty} S_p, \qquad (14)$$

burada S_p- (10)-dakı inteqralların qiymətləridir.

ƏSAS NƏTİCƏLƏR

Qeyri-müntəzəm divarlı düzbucaqlı dalğaötürənin səthi impendansı üçün alınmıG (13) riyazi modelinin köməyilə istənilən dəqiqlik dərəcəsilə Z_s-i təyin etmək olar.
Z_s –in təyini üsulundan daha mürəkkəb (məsələn rabitə deGiyinin düzbucaqlı dalğaötürənin geniGdivarında yerləGməsi zamanı) sistemlərin tədqiqi üçün istifadə etmək olar.

1. И.Дж.Исламов, *Численное электромагнитных полей в сверхвысокочастотных элементах и устройствах.Баку, Элм,* (2005) 250.
2.М.А.Миллер, В.И.Таланов, *Радиофизика,* **4** (2001) 795.
3. Г.Т.Марков , А.Ф.Чаплин, *Возбуждение электромагнитных волн. Л.Энергия*, (1987) 376.
4. Г.Птолстой, *Ряды Фуръе. М. Наука,* (2000) 384.
5.Г.Бейтман, А.Эрдейи, *Высшие трансендентные функции, Пер.с.англ. М. Наука*, **2** (2004) 296.

MATHEMATICAL MODEL SUPERFICIAL İMPENDENCE IN THE MICROWAVE RECTANGULAR WAVE GUIDE WITH IRREGULAR THE NARROW WALL

R.J. RASULOV

It has been developed mathematical model superficial импенданса in a rectangular wave guide with an irregular narrow wall. By means of the received mathematical model it has been possible with sufficient degree of accuracy to define superficial resistance of such wave guide. It has been shown that the method of definition of superficial resistance could be used also for research of difficult systems.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОВЕРХНОСТНОГО ИМПЕНДАНСА В СВЕРХВЫСОКОЧАСТОТНОМ ПРЯМОУГОЛЬНОМ ВОЛНОВОДЕ С НЕРЕГУГЯРНОЙ УЗКОЙ СТЕНКОЙ

Р.Дж.РАСУЛОВ

Разработана математическая модель поверхностного импенданса в прямоугольном волноводе с нерегулярной узкой стенкой. С помощью полученной математической модели можно с достаточной степенью точности определить поверхностное сопротивление такого волновода. Показано, что метод определения поверхностного сопротивления можно использовать также для исследования сложных систем.

Редактор: К.Нуриев

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ФУНКЦИЯ ВИГНЕРА ДЛЯ КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ РЕЛЯТИВИСТСКОГО ЛИНЕЙНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА ВО ВНЕШНЕМ ПОЛЕ

Ш.М.НАГИЕВ, Г.Г.КУЛИЕВА, К.Ш.ДЖАФАРОВА

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г. Джавида, 33

Построено Вигнеровское представление для релятивистской модели линейного гармонического осциллятора во внешнем однородном поле. Данная модель описывается конечно-разностным уравнением. Найден явный вид квантовой функции распределения Вигнера для когерентных состояний. Показано, что она имеет правильней нерелятивистский предел.

ВВЕДЕНИЕ

В работах [1-7] построена и развита релятивистская квантовая механика, основанная на квазипотенциальном подходе в релятивистском конфигурационном $\vec{r}$-пространстве [1]. Она обладает многими важнейшими чертами нерелятивистской квантовой механики. Существенное отличие от квантовой механики состоит в том, что гамильтониан в рассматриваемой релятивистской квантовой механике является дифференциально-разностным оператором. Преобразование между релятивистским $\vec{r}$-пространством и канонически сопряженным ему импульсным $\vec{p}$-пространством осуществляется с помощью релятивистской плоской волны

$$\xi(\vec{p},\vec{r})=\left(\frac{p_0-\vec{p}\vec{n}}{mc}\right)^{-1-ir/\lambda\!\!\!^{-}}, \tag{1}$$

$$\vec{r}=r\vec{n},\ \vec{n}=(\sin\vartheta\cos\varphi,\sin\vartheta\sin\varphi,\cos\vartheta),$$

$$0<r<\infty,\ p_0=\sqrt{\vec{p}^2+m^2c^2},$$

которая отличается от обычной плоской волны $\exp(i\vec{p}\vec{r}/\hbar)$ в нерелятивистском случае. Функции (1) реализуют бесконечные унитарные неприводимые представления группы Лоренца.

Импульсы частиц в релятивистской области принадлежат трехмерному пространству Лобачевского. Здесь моделью пространства Лобачевского служит верхняя пола массовой поверхности $p_0^2-\vec{p}^2=m^2c^2$, $p_0>0$ частицы с массой m, группой движения которого является группа Лоренца.

В релятивистском конфигурационном $\vec{r}$-представлении волновая функция относительного движения частиц записывается в виде трехмерного конечно-разностного уравнения с шагом, равным комптоновской длине волны частицы $\lambda\!\!\!^{-}=\hbar/mc$, т.е.

$$[H_0+V(\vec{r},E)]\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}), \tag{2}$$

здесь свободный гамильтониан является конечно - разностным оператором

$$H_0=mc^2ch\lambda\!\!\!^{-}\partial_r+\frac{i\hbar c}{r}shi\lambda\!\!\!^{-}\partial_r-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta_{\vartheta,\varphi}}{r^2}e^{i\lambda\!\!\!^{-}\partial_r}, \tag{3}$$

где $\Delta_{\vartheta,\varphi}$ - есть угловая часть трехмерного оператора Лапласа, $V(\vec{r},E)$– зависящий в общем случае от энергии квазипотенциал, а $\partial_r=\partial/\partial r$.

В одномерном случае плоская волна (1) принимает вид

$$\xi(p,x)=\left(\frac{p_0-p}{mc}\right)^{-ix/\lambda\!\!\!^{-}}=e^{ix\chi/\lambda\!\!\!^{-}}, \tag{4}$$

где $\chi = \ln\left(\frac{p_0 + p}{mc}\right)$ - быстрота.

Выпишем условия ортогональности и полноты для функции (4)

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int \xi^*(p',x)\xi(p,x)dx = \frac{p_0}{mc}\delta(p-p') = \delta(\chi-\chi'), \tag{5}$$

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int \xi^*(p,x')\xi(p,x)d\Omega_p = \delta(x-x'),$$

где $d\Omega_p = mc\frac{dp}{p_0} = mcd\chi$ - инвариантный элемент интегрирования в одномерном импульсном пространстве.

Плоские волны (4) являются собственными функциями релятивистского свободного гамильтониана $H_0 = mc^2 chi\lambda\partial_x$

$$\left(\hat{H}_0 - E_p\right)\xi(p,x) = 0\,,\ E_p = c\sqrt{\vec{p}^2 + m^2c^2}\ . \tag{6}$$

Связь между волновыми функциями в x - и p - представлениях задается соотношением

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int \xi(p,x)\phi(p)d\Omega_p\ . \tag{7}$$

В рамках конечно-разностной релятивистской квантовой механики были рассмотрены релятивистские обобщения некоторых точно решаемых задач (потенциальная яма [2], кулоновский потенциал [2], гармонический осциллятор [3,4], q-осциллятор [5,6], сингулярный осциллятор [7] и.т.д) нерелятивистской квантовой механики. С другой стороны, как известно, существуют несколько формулировок нерелятивистской квантовой механики. Одна из них – формулировка квантовой механики в фазовом пространстве - использует для описания свойств квантовых физических систем квантовые функции распределения [8-12]. Фазовое представление дает вазможность описывать картину квантовых явлений, используя, насколько это возможно, классический язык. Оно имеет дело только c числовыми величинами и уравнениями, а не операторами, что иногда упрощает математическое описание квантовых систем. Это обьясняет интенсивное использование в прошлом и в настоящем фазового [11] представления в различных областях физики, как статистическая физика, квантовая оптика [13], теория рассеяния [14].

К квантовым функциям распределения $F(p,x,t)$ относятся, например, функции распределения Вигнера [8], Глаубера–Сударшана [13,15], Хусими [13,15], Кирквуда [17], стандартно-упорядоченная функция распределения [18]. Они являются функциями импульса p и координаты x, а также, в общем случае, времени t и во многом аналогичны совместной плотности вероятностей для координаты x и импульса p, но обладают еще рядом характерных особенностей, не позволяющих интерпретировать их таким образом. Причиной, препятствующей введению совместного распределения вероятностей в квантовой механике, является некоммутативность операторов координаты $\hat{x}$, и импульса $\hat{p}$, т.е. невозможность одновременного измерения координаты и импульса квантовой частицы. В квантовой механике речь может идти лишь о нахождении распределения вероятностей для координат и импульсов в отдельности, а не тех и других вместе. Поэтому квантовые функции распределения должны

рассматриваться как математические средства, облегчающие квантовые вычисления. Их называют квазивероятностью или квазиплотностью совместного распределения вероятностей p и x.

В одномерном случае общий класс квантовых функций распределения для чистых состояний в координатом представлении определяется формулой [9,12]

$$F^f(p,x,t)=\frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}d\lambda d\mu dx'\psi^*\left(x'-\frac{1}{2}\mu\hbar,t\right)\psi\left(x'+\frac{1}{2}\mu\hbar,t\right)\times$$
$$\times f(\lambda,\mu)e^{i\lambda(x'-x)}e^{-i\mu p}, \tag{4a}$$

а в импульсном представлении – формулой

$$F^f(p,x,t)=\frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty}d\lambda d\mu dp'\Phi^*\left(p'+\frac{1}{2}\lambda\hbar,t\right)\Phi\left(p'-\frac{1}{2}\lambda\hbar,t\right)\times$$
$$\times f(\lambda,\mu)e^{i\mu(p'-p)}e^{-i\lambda x}, \tag{4b}$$

где $\psi(x,t)$ и $\Phi(p,t)$ - волновые функции состояния системы в координатном и импульсном представлениях, соответственно.

Различному выбору функции $f(\lambda,\mu)$ соответствует различная квантовая функция распределения. Например, при $f(\lambda,\mu)=1$ формула (4) дает функцию Вигнера

$$W(p,x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dx'\psi^*\left(x-\frac{x'}{2},t\right)\psi\left(x+\frac{x'}{2},t\right)e^{-ipx'/\hbar}= \tag{5a}$$

$$=\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dp'\Phi^*\left(p+\frac{p'}{2},t\right)\Phi\left(p-\frac{p'}{2},t\right)e^{-ip'x/\hbar}, \tag{5b}$$

при $f(\lambda,\mu)=e^{-\frac{i\hbar\lambda\mu}{2}}$ – стандартно-упорядоченную квантовая функцию распределения

$$F^s(p,x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\psi^*(x,t)\Phi(p,t)e^{ipx/\hbar}, \tag{6a}$$

а при $f(\lambda,\mu)=\exp\left(-\frac{\hbar\lambda^2}{4m\kappa}-\frac{\hbar m\kappa\mu^2}{4}\right)$- функцию Хусими

$$F^H(p,x,t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{m\kappa}{\pi\hbar}}\left|\int_{-\infty}^{\infty}dx\psi(x',t)e^{-\frac{m\kappa(x-x')^2}{2\hbar}-\frac{ipx'}{\hbar}}\right|^2, \tag{7a}$$

где κ – произволная положительная постоянная.

Квантовые функции распределения для ряда простых нерелятивистских квантово-механических систем (гармонический осциллятор, осциллятор Морса, бесконечная потенциальная яма, поле излучения в когерентном состоянии и.т.д) изучались различными авторами [2,3,7]. В частности функция распределения Вигнера для стационарных состояний нерелятивистского линейного осциллятора имеет вид

$$W_{Nn}^0(p,x)=\frac{(-1)^n}{\pi\hbar}e^{-(\eta^2+\xi^2)}L_n\left(2\eta^2+2\xi^2\right), \tag{8}$$

где $\eta=\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}$, $\xi=x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, а $L_n(x)$ – полиномы Лагерра. Если осциллятор находится во внешнем однородном поле $V_g(x)=gx$, то в этом случе функция Вигнера получается из (8) заменой $\xi\to\xi+\xi_0$ (см, например, [19]), т.е

$$W_{Nn}^{g}(p,x)=e^{\xi_0\partial_\xi}W_{Nn}^{0}(p,x)=\frac{(-1)^n}{\pi\hbar}e^{-\left(\eta^2+(\xi+\xi_0)^2\right)}L_n\left(2\eta^2+2(\xi+\xi_0)^2\right),$$

где $\xi_0=x_0\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$, $x_0=\frac{g}{m\omega^2}$.

Таким образом, представляет большой интерес формулировка релятивистской квантовой механики в фазовом пространстве. В работе [19] построено представление Вигнера для релятивистской модели линейного гармонического осциллятора, описываемой конечно-разностым уравнением: найден явный вид фунции Вигнера для стационарных и когерентных состояний, а также для состояний термодинамического равновесия. В работе [20] вычислены функции Вигнера для стационарных состояний и состояний термодинамического равновесия для этой модели осциллятора при наличии внешнего однородного поля $V_g(x)=gx$.

Целью данной работы является вычисление функцию Вигнера для когерентных состояний релятивистской модели линейного осциллятора, находящегося во внешнем однородном поле.

ФУНКЦИЯ ВИГНЕРА ДЛЯ КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ. НЕРЕЛЯТИВИСТСКИЙ СЛУЧАЙ

В нерелятивистской квантовой механике гамильтониан линейного гармонического осциллятора во внешнем однородном поле

$$H_N^g=\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\partial_\xi^2+\xi^2+2\xi\xi_0\right)=\hbar\omega\left(b^+b+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\xi_0^2\right) \tag{8a}$$

факторизуется с помощью операторов уничтожения b и рождения b^+

$$b=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\xi_0+\partial_\xi\right)=a+\frac{\xi_0}{\sqrt{2}},\ b^+=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi+\xi_0-\partial_\xi\right)=a^++\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}, \tag{9}$$

удовлетворяющих коммутационному соотношению $\left[b,b^+\right]=1$.Собственные функции оператора (8а)

$$\psi_{Nn}^{g}(x)=c_{Nn}H_n(\xi+\xi_0)e^{-\frac{1}{2}(\xi+\xi_0)^2}, \tag{10}$$

$$c_{Nn}=\frac{c_{N0}}{\sqrt{2^n n!}},\ c_{N0}=\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}$$

выражаются через полиномы Эрмита $H_n(x)$ [21], соответствующие собственным значениям энергии

$$E_{Nn}^{g}=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\xi_0^2\right),\ n=0,1,2,\ldots \tag{11}$$

Они удовлетворяют условию ортогональности

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_{Nn}^{g}(x)\psi_{Nm}^{g}(x)dx=\delta_{mn}. \tag{12}$$

Волновые функции $\psi_{Nn}^{g}(x)$ (10) могут быть получены простым сдвигом из волновых функций нерелятивистского линейного осциллятора при отсутствии поля, т.е при $g=0$

$$\psi_{Nn}^{g}(x)=e^{x_0\partial_x}\psi_{Nn}^{0}(x)=\psi_{Nn}^{0}(x+x_0). \tag{13}$$

Соответствующая связь в импульсном представлении имеет вид:

$$\phi_{Nn}^{g}(p)=e^{\frac{ix_0 p}{\hbar}}\phi_{Nn}^{0}(p). \tag{14}$$

КОГЕРЕНТНЫЕ СОСТОЯНИЯ

Построим теперь когерентные состояния [22] для нерелятивистского гармонического линейного осциллятора при наличии внешнего однородного поля (8а). Они являются собственными функциями оператора уничтожения, т.е. $b|\alpha_N, g\rangle=\alpha_N|\alpha_N, g\rangle$. Их можно разложить по собственным векторам гамильтониана (8а), т.е.

$$|\alpha_N, g\rangle=e^{-\frac{1}{2}|\alpha_N|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha_N^n}{\sqrt{n!}}\psi_{Nn}^{g}. \tag{15}$$

Учитывая (13) и (14), мы можем выразить $|\alpha_N, g\rangle$ через когерентные состояния нерелятивистского гармонического линейного осциллятора без поля: в x - представлении $(\langle x|\alpha_N, g\rangle\equiv\psi_{\alpha_N}^{g}(x))$

$$\psi_{\alpha N}^{g}(x)=e^{x_0\partial_x}\psi_{\alpha N}^{0}(x)=c_{N0}e^{\Gamma_g},\ c_{N0}=\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}, \tag{16а}$$

в р-представлении $(\langle p|\alpha_N, g\rangle\equiv\psi_{\alpha N}^{g}(p))$

$$\psi_{\alpha N}^{g}(p)=e^{\frac{ix_0 p}{\hbar}}\psi_{\alpha N}^{0}(p)=c'_{N0}e^{\Gamma'_g},\ c'_{N0}=(\pi m\hbar\omega)^{-1/4}, \tag{16в}$$

$$\Gamma_g=-\frac{|\alpha_N|^2}{2}+\frac{\alpha_N^2}{2}-\frac{1}{2}\left(\xi+\xi_0-\sqrt{2}\alpha_N\right)^2, \tag{17}$$

$$\Gamma'_g=-\frac{|\alpha_N|^2}{2}-\frac{\alpha_N^2}{2}-\frac{1}{2}\left(\eta+\sqrt{2}\alpha_N\right)^2+i\xi_0\eta.$$

ФУНКЦИЯ ВИГНЕРА ДЛЯ КОГЕРЕНТНЫХ СОСТОЯНИЙ

С помощью интегральной формулы [23]

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2+bx}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{-\frac{b^2}{4a}},\ \mathrm{Re}\,a>0$$

и явного вида когерентных состояний (16) легко показать, что соответствующая функция Вигнера записывается как

$$W_{\alpha_N}^{g}(p,x)=\frac{1}{\pi\hbar}\exp\left[-\left(\eta-\sqrt{2}\mathrm{I}_m\alpha_N\right)^2-\left(\xi+\xi_0-\sqrt{2}\,\mathrm{Re}\,\alpha_N\right)^2\right]. \tag{18}$$

Функции (16) и (18) нормированы на единицу.

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ СЛУЧАЙ

Гамильтониан релятивистского линейнего осциллятора во внешнем однородном поле имеет вид [24]

$$H^g=mc^2chi\lambda\partial_x+\frac{m\omega^2}{2}x(x+i\lambda)e^{i\lambda\partial_x}+gx. \tag{19}$$

При $|g|<mc\omega$ спектр энергии дискретен

$$E_n=\hbar\omega\delta(n+\nu),\ n=0,1,2,..., \tag{20}$$

где введены обозначения $\delta=\sin\varphi$, $\varphi=\arccos\frac{g}{mc\omega}=\arccos\frac{\xi_0}{\sqrt{\mu}}$

$$\nu = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \mu^2}\ ,\ \mu = \frac{mc^2}{\hbar\omega}.$$

Собственные функции H^g (19), соответствующие собственным значениям (20), выражаются через полиномы Мейкснера – Поллачека $P_n^\nu(x;\varphi)$

$$\psi_n^g(x) = c_n^g \left(\frac{\hbar\omega}{mc^2}\right)^{ix/\lambda\!\!\!^-} \Gamma\left(\nu + \frac{ix}{\lambda\!\!\!^-}\right) P_n^\nu\left(\frac{x}{\lambda\!\!\!^-};\varphi\right) e^{(\varphi-\pi/2)x/\lambda\!\!\!^-}, \tag{21}$$

и нормированы условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^{g^*}(x)\psi_m^g(x)dx = \delta_{nm}. \tag{22}$$

В импульсном представлении волновые функции (20) выражаются через полиномы Лагерра

$$\psi_n^g(p) = c_n^{g'} \zeta^\nu \exp\left(i\zeta e^{i\varphi}\right) L_n^{2\nu-1}(2\delta\zeta), \tag{23}$$

где $\zeta = \dfrac{c(p_0+p)}{\hbar\omega} = \left(\eta + \sqrt{\eta^2+\mu^2}\right)\sqrt{\mu}$, $c_n^{g'} = i^n (2\delta)^\nu \sqrt{\dfrac{n!}{mc\Gamma(n+2\nu)}}$.

Обобщенные когерентные состояния [22] для модели (19) были построены в [25] путем действия на основное состояние $\psi_0^g(x)$ или $\Phi_0^g(p)$ оператором $D(\alpha) = \exp\left(\beta K_+^g - \beta^* K_-^g\right)$, где $\beta = -\dfrac{\tau}{2} e^{-i\tilde{\phi}}$ - некоторое комплексное число. Например, в x - представлении имеем

$$\psi_\alpha^g(x) = D(\alpha)\psi_0^g(x) = \left(1-|\alpha|^2\right)^\nu e^{\alpha K_+^g} \psi_0^g(x),\ \alpha = -th\frac{\tau}{2} e^{-i\tilde{\phi}}. \tag{24}$$

Генераторы динамической группы симметрии $SU(1,1)$ модели (19) имеют вид [24]

$$K_0^g = \frac{1}{\hbar\omega\delta} H^g,\ K_\pm^g = \pm i K_0^g + \tilde{x} + \mu e^{\mp i\varphi - i\partial_{\tilde{x}}}. \tag{25}$$

В нерелятивистском пределе

$$\lim_{c\to\infty} \frac{K_+^g}{\sqrt{2\mu}} = b^+,\ \lim_{c\to\infty} \frac{K_-^g}{\sqrt{2\mu}} = b. \tag{26}$$

Из условия $\lim\limits_{c\to\infty}\left(\beta K_+^g - \beta^* K_-^g\right) = \alpha_N b^+ - \alpha_N^* b$ следует что при $c\to\infty$ $\beta \simeq \dfrac{\alpha_N}{\sqrt{2\mu}}$ и $\alpha \simeq \dfrac{\alpha_N}{\sqrt{2\mu}}$. Приведем явный вид когерентных состояний в импульсном представлении

$$\psi_\alpha^g(p) = b_\nu^g(\alpha)\zeta^\nu e^{-\gamma\zeta}, \tag{27}$$

где $b_\nu^g(\alpha) = \dfrac{1}{\sqrt{mc\Gamma(2\nu)}}\left[\dfrac{2\delta\left(1-|\alpha|^2\right)}{(1-i\alpha)^2}\right]^\nu$, $\gamma = -\dfrac{ie^{i\varphi} + \alpha e^{-i\varphi}}{1-i\alpha}$.

Функцию Вигнера для когерентных состояний релятивистской модели линейного осциллятора во внешнем однародном поле определим следующим образом [19, 20]

$$W_\alpha^g(p,x)=\frac{1}{2\pi\lambda}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_\alpha^{g*}\left(\chi-\frac{\chi'}{2}\right)e^{i\tilde{x}\chi'}\psi_\alpha^g\left(\chi+\frac{\chi'}{2}\right)d\chi'. \tag{28}$$

После преобразования подынтегралыного выражения, приходим к представлению вида

$$W_\alpha^g(p,x)=\frac{\left|b_\nu^g(\alpha)\right|^2}{2\pi\lambda}\zeta^{2\nu}\int_0^{\infty}e^{-\gamma\zeta y-\gamma^*\zeta/y}y^{2i\tilde{x}-1}dy. \tag{29}$$

Пользуясь интегральной формулой для функции Макдональда [26]

$$\int_0^{\infty}y^{\mu-1}e^{-ay-b/y}dx=2\left(\frac{b}{a}\right)^{\mu/2}K_\mu\left(2\sqrt{ab}\right),\ \mathrm{Re}\,a>0,\ \mathrm{Re}\,b>0,$$

мы получим из (29) для функции Вигнера в случае для когерентных состояний (27) релятивистской модели (19) линейного осциллятора следуюшее выражение

$$W_\alpha^g(p,x)=\frac{\left|b_\nu^g(\alpha)\right|^2}{\pi\lambda}e^{2\phi\tilde{x}}\zeta^{2\nu}K_{2i\tilde{x}}\left(2|\gamma|\zeta\right),\ \gamma=|\gamma|e^{i\phi}. \tag{30}$$

Функции (27) и (30) нормированы на единицу, т.е

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\psi_\alpha^g(p)\right|^2d\Omega_p=1,\ \int_{-\infty}^{\infty}W_\alpha^g(p,x)d\Omega_p dx=1. \tag{31}$$

При выводе (31) мы воспользовались интегральной формулой

$$J_\delta=\int_{-\infty}^{\infty}e^{2\delta x}\left|\Gamma(\nu+ix)^2\right|dx=\frac{2\pi\Gamma(2\nu)}{(2\cos\delta)^{2\nu}},\ -\frac{\pi}{2}<\delta<\frac{\pi}{2}, \tag{32}$$

которая следует из (22) при $n=m=0$.

Учтя соотношение [26]

$$\int_0^{\infty}x^{\alpha-1}K_\nu(cx)dx=2^{\alpha-2}c^{-\alpha}\Gamma\left(\frac{\alpha+\nu}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\alpha-\nu}{2}\right),\ \mathrm{Re}\,\alpha>|\mathrm{Re}\,\nu|,\ \mathrm{Re}\,c>0,$$

легко можно показать, что средние значения координаты и импульса релятивистского осциллятора при наличии внешнего однородного поля, подсчитанные с помощью функции $W_\alpha^g(p,x)$, равны

$$\bar{x}_\alpha=\int_{-\infty}^{\infty}xW_\alpha^g(p,x)d\Omega_p dx=\lambda\nu tg\phi, \tag{33a}$$

$$\bar{p}_\alpha=\int_{-\infty}^{\infty}pW_\alpha^g(p,x)d\Omega_p dx=\frac{\hbar\omega\nu}{2c\,\mathrm{Re}\,\gamma}-\frac{m^2c^3\,\mathrm{Re}\,\gamma}{\hbar\omega(2\nu-1)}, \tag{33b}$$

где $\mathrm{Re}\,\gamma=\dfrac{\delta\left(1-|\alpha|^2\right)}{\left|1-i\alpha\right|^2}>0$.

Используя формулы, приведенные в приложении можно показать, что функции $\psi_0^g(p)$, $\psi_\alpha^g(p)$, $W_\alpha^g(p,x)$ имеют правильные нерелятивистские пределы:

$$\lim_{c\to\infty}e^{-i\sqrt{\mu}\xi_0}\psi_0^g(p)=\psi_{N0}^g(p),\ \lim_{c\to\infty}e^{-i\sqrt{\mu}\xi_0}\psi_\alpha^g(p)=\psi_{N\alpha_N}^g(p),\ \lim_{c\to\infty}W_\alpha^g(p,x)=W_{N\alpha_N}^g(p,x). \tag{34}$$

При нерелятивистском пределе для средних значеней координаты (33а) и импульса (33в) получаем

$$\lim_{c\to\infty}\bar{x}_\alpha=\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,\mathrm{Re}\,\alpha_N-x_0,\ \lim_{c\to\infty}\bar{p}_\alpha=\sqrt{2\hbar m\omega}\,\mathrm{I}_m\alpha_N. \tag{35}$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Формулировка релятивистской квантовой механики в фазовом пространсве является актуальной задачей. В этой работе мы построили квантовую функцию распределения Вигнера для когерентных состояний для релятивистской модели гармонического линейного осциллятора во внешнем однородном поле. Показали, что они имеют правильные нерелятивистские пределы. Мы надеемся, что полученные результаты найдут применение при решении различных задач теоретической физики.

Теоретико-групповой основой данной релятивистской модели линейнего осциллятора является группа Ли $SU(1,1)$. Генераторы этой группы реализуются в виде конечно-разностных операторов в релятивистском конфигурационном x-представлении систем, актуальных и в связи с рассмотрением проблемы дискретности пространства.

ПРИЛОЖЕНИЕ

В этом приложении приводим некоторые асимптотические формулы, которые используются для нахождения нерелятивистского предела релятивистских величин. При $\mu \to \infty$ имеем

$$\varphi \simeq \frac{\pi}{2} - \frac{\xi_0}{\sqrt{\mu}}, \ \delta \simeq 1 - \frac{\xi_0^2}{\mu},$$

$$\zeta \simeq \mu + \sqrt{\mu}\eta + \frac{\eta^2}{2}, \ \nu \simeq \mu + \frac{1}{2}, \tag{A1}$$

$$e^{i\varphi} \simeq i + \frac{\xi_0}{\sqrt{\mu}} - \frac{i\xi_0^2}{2\mu}, \ \phi = arctg\frac{I_m\gamma}{\mathrm{Re}\gamma} \simeq \frac{\sqrt{2}\,\mathrm{Re}\alpha_N - \xi_0}{\sqrt{\mu}}$$

$$\phi x/\lambda\!\!\!^{-} \simeq \left(\sqrt{2}\,\mathrm{Re}\alpha_N - \xi_0\right)\xi,$$

$$\Gamma(2\nu) \simeq \sqrt{\frac{\pi}{\mu}} e^{2\nu\ln 2\nu - 2\nu} \tag{A2}$$

$$K_{2ix/\lambda\!\!\!^{-}}(2|\gamma|\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{4\mu|\gamma|}} e^{-2|\gamma|\mu + 2|\gamma|\sqrt{\mu}\eta - |\gamma|\eta^2 - \frac{\xi^2}{|\gamma|}},$$

$$|\gamma| \simeq 1 - \frac{\sqrt{2}I_m\alpha_N}{\sqrt{\mu}} + \frac{(I_m\alpha_N)^2 - \sqrt{2}\xi_0\,\mathrm{Re}\alpha_N}{\mu}, \tag{A3}$$

$$b_\nu^g(\alpha) \simeq c'_{N_0} e^{-\nu\ln\nu + \nu - \frac{1}{2}|\alpha_N|^2 - \frac{1}{2}\alpha_N^2 - \frac{\xi_0^2}{2} + i\sqrt{2\mu}\alpha_N}.$$

1. V.G.Kadyshevsky, R.M.Mir-Kasimov, N.B.Skachkov, *Nuovo Cimento,* **55A** (1968) 223
2. В.Г.Кадышевский, R.M.Мир-Касимов, Н.Б.Скачков, *ЯФ,* **9** (1969) 212
3. В.Г.Кадышевский, Р.М. Мир-Касимов, М.Фриман, *ЯФ,* **9** (1969) 646.
4. M.Freeman, M.D.Mateev, R.M.Mir-Kasimov, *Nucl. Phys*., **B12** (1969) 197.
5. А.А.Донков, В.Г.Кадышевский, М.Д.Матеев, Р.М.Мир-Касимов, *ТМФ,* **8** (1971) 61.
6. В.Г.Кадышевский, Р.М.Мир-Касимов, Н.Б.Скачков, *ЭЧАЯ,* **2** (1972) 636.
7. K.S.Jung, K.N.Chung, R.S.Willey, *Phys. Rev.,* **D12** (1975) 1999.
8. E.P.Wigner, Phys. Rev., **40** (1932) 749.

9. M.R.Hillery, O'Connell, M.O.Scully, E.P.Wigner, Phys. Rep., **106** (1984) 121.
10. В.И.Татарский, УФН, **139** (1983) 587.
11. J.E.Moyal, Proc. Combridge Philos. Sos., **45** (1949) 99.
12. H.W.Lee, Phys. Rep., **259** (1995)147.
13. R.Glauber, J. Phus. Rev., **131** (1963) 2766.
14. H.W.Lee., M.O.Scully, Chem. J Phys., **73** (1980) 2238-2242; Found. Phys., **13** (1983) 61.
15. E.C.Sudarşan, G. Phys. Rev. Lett., **10** (1963) 277.
16. K.Husimi, Proc. Phys. Math. Soc. Japan., **22** (1940) 264.
17. J.G.Kirkwood, Phys.Rev., 44(1933) 31.
18. C.L. Mehta, J.Math. Phys., **5** (1964) 677.
19. Н.М.Атакишиев, Ш.М.Нагиев, К.Б.Вольф, ТМФ, **114** (1998) 410.
20. Sh.M.Nagiyev, G.H.Guliyeva, E.I.Jafarov, J. Phys, A: Math.Theor., **42** (2009) 454015.
21. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика, М., Наука, (1989).
22. A.M.Perelomov, Generalized Coherent States and Their Applications, Berlin: Springer-Verlag, (1986).
23. А.П.Прудников, Ю.А.Брычков, О.Н.Маричев, Интегралы и ряды, М.: Наука, **1, 2** (1981).
24. Р.М.Мир-Касимов, Ш.МНагиев, Е.Д.Каграманов, Препринт ИФАН АзСССР Баку, (1987) №214.
25. N.MAtakishiyev, K.ВюWolf, Rep. Math. Phys., (Warsaw), **28** (1990) 21.
26. А.П.Прудников, Ю.А.Брычков, О.НМаричев, Интегралы и ряды, Т.**2,** Специальные функции, М.: Наука, (1983).

XARİCİ SAHƏDƏ RELYATİVİSTİK XƏTTİ OSSİLYATORUN KOHORENT HALLARI ÜÇÜN VİQNER FUNKSİYASI

Ş.M.NAĞIYEV, G.H.QULIYEVA, K.Ş.CƏFƏROVA

Xarici bircins sahədə yerləşən harmonik ossilyatorun relyativistik modeli üçün Viqner təsviri qurulmuşdur. Bu model sonlu-fərq tənliyi ilə idarə olunur. Viqner kvant paylanma funksiyasının aşkar şəkli tapılmışdır. Göstərilmişdir ki, o düzgun qeyri-relyativistik limitə malikdir.

WIGNER FUNCTION FOR THE COHERENT STATES OF THE RELATIVISTIC LINEAR OSCILLATOR IN AN EXTERNAL FIELD

S.M.NAGIYEV, G.H.GULIYEVA, K.S.JAFAROVA

Wigner representation for a relativistic model of the linear harmonic oscillator in a homogeneous external field has been constructed. This model has been described by a finite-difference equation. Wigner quantum distribution function for the coherent states has been found. It has been shown that it had a correct nonrelativistic limit.

Редактор: А.Халилова

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ПОЛИМОРФНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ В КРИСТАЛЛАХ $TlInSe_2$ И ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФАЗ

О.З.АЛЕКПЕРОВ, А.И.НАДЖАФОВ, Г.Г.ГУСЕЙНОВ, А.П.АБДУЛЛАЕВ*

Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр. Джавида, 33
*Институт Радиационных проблем НАН Азербайджана**
AZ 1143, г.Баку, ул.Ф.Агаева, 9

Методами дифференциально-термического, рентгенофазового, и микроструктурного анализов исследованы сплавы системы $TlInSe_2$-Se со стороны $TlInSe_2$ и построена диаграмма состояния системы. На основе $TlInSe_2$ обнаружена область растворимости, доходящая при эвтектической температуре до 8,0ат.%, при комнатной температуре до 5,0ат.% Se.

На термограммах сплавов системы $TlInSe_2$ -Se с содержанием 2,0÷6,0ат.% Se обнаружен твердофазный переход при температуре 363К имеющий максимальное значение термического эффекта для сплава состава $(TlInSe_2)_{0,96}$-$Se_{0,04}$.

Показано, что структура образцов твердых растворов в указанной системе отожженных при 353 К соответствует упорядоченным структурам на базе структуры $TlInSe_2$. С помощью аналитического метода индицирования рентгеновских отражений было установлено, что структура твердого раствора состава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ при T<363К соответствует ромбическому варианту структуры. Определена пространственная группа симметрии (P222) и значения параметров решетки вновь обнаруженной модификации: a=6,57Å; b=10,08Å; c=11,28Å. Установлено, что ромбическая модификация $TlInSe_2$ устойчива при температурах ниже 363К и выше указанной температуры превращается в тетрагональную модификацию (I4/mcm).

Соединение $TlInSe_2$ является структурным аналогом селенида таллия (TlSe) и кристаллизуется в тетрагональной решетке (пространственная группа I4/mcm) с параметрами: a=8,075Å; b=6,874Å; Z=4; d_p=7,098г/см^3 [1]. Согласно литературным данным полиморфные разновидности $TlInSe_2$ не обнаружены. Физико-химические исследования систем TlS-S и TlSe-Se [2-3] показали, что моносульфид и моноселенид таллия в твердом состоянии растворяют избыточное против стехиометрии количество халькогена, максимальное значение которого при комнатной температуре достигает 5,0ат.%. Рентгеноструктурные исследования твердых растворов TlS_{1+x} [2,4] и $TlSe_{1+x}$ [3] показали, что избыточное количество растворенного халькогена в составе в этих соединений стимулирует, соответственно, структурный фазовый переход в моноклинную и в ромбическую сингонию.

Следует отметить, что система $TlInSe_2$-Se не исследована. В настоящей работе обсуждаются результаты комплексных физико-химических исследований сплавов системы $TlInSe_2$-Se со стороны $TlInSe_2$, а также результаты электрофизических исследований сплавов твердых растворов $TlInSe_{2+x}$.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для исследования диаграммы состояния $TlInSe_2$-Se нами был синтезирован сплавы, содержащие 0÷10,0ат.% Se с промежутком 1,0ат.%. Сплавы были приготовлены прямым однотемпературным методом синтеза из компонентов с чистотой не менее 99,999% в вакуумированных до 10^2Па кварцевых сосудах Степанова и отожжены при 570±5К в течение двух недель до наступления равновесного состояния, определяемого рентгенофазовым (РФА) и микроструктурным (МСА) анализом.

Сплавы системы были исследованы методами дифференциально-термического (ДТА), рентгенофазового и микроструктурного анализов. ДТА был проведен снятием кривых нагревания и охлаждения на низкочастотном термографическом регистраторе НТР–70 в пределах температур 293÷1075К. Для

проведения количественных расчетов использовались одинаковые количества сплавов и стандартные условия съемки термограмм. Погрешность измерения температуры не превышала ±1К. Дифрактограммы отожженных сплавов снимались на установке ДРОН–2 с использованием Cu-K_α излучения в интервале углов $4^\circ<\theta<35^\circ$ при постоянном режиме съѐмки (ток – 20мА, напряжение на трубке – 35кВ). Микроструктурный анализ был проведен с помощью металлографического микроскопа МИМ–8М при увеличениях 150-300.

Построенная по кривым нагревания диаграмма состояния системы $TlInSe_2$–Se со стороны $TlInSe_2$ показана на Рис.1. Согласно данным ДТА и МСА на основе $TlInSe_2$ в системе имеется область растворимости, доходящая при эвтектической температуре до 8,0ат.%, а при комнатной температуре – до 5,0ат.%Se. Для построения линии сольвуса были проведены микроструктурные исследования сплавов содержащих 5,0; 6,0 и 7,0ат.% Se отожженных при температурах 323; 373 и 573К в течение недели. Линия сольвуса была проведена между одно- и двухфазными состояниями сплавов. Согласно данным ДТА эвтектическая температура в системе соответствует 783±1К. На кривых нагревания сплавов с содержанием 3,0; 4,0; 5,0; 6,0ат.% Se при температуре 363К был обнаружен эндотермический эффект, соответствующий твердофазному превращению в сплавах. При охлаждении указанное превращение присутствовало на кривых в виде экзотермического эффекта, наблюдаемого при более низких температурах ~(358÷360)К. Построение треугольника Таммана показало, что эффект твердофазного превращения максимален для сплава с содержанием 4,0ат.% Se (Рис.1).

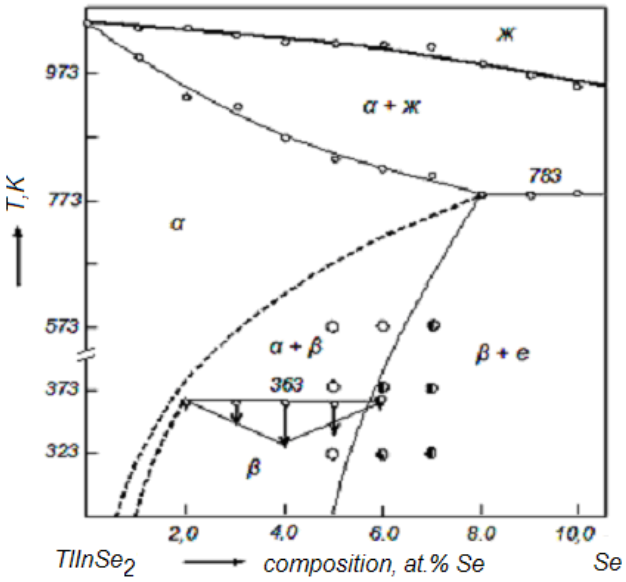
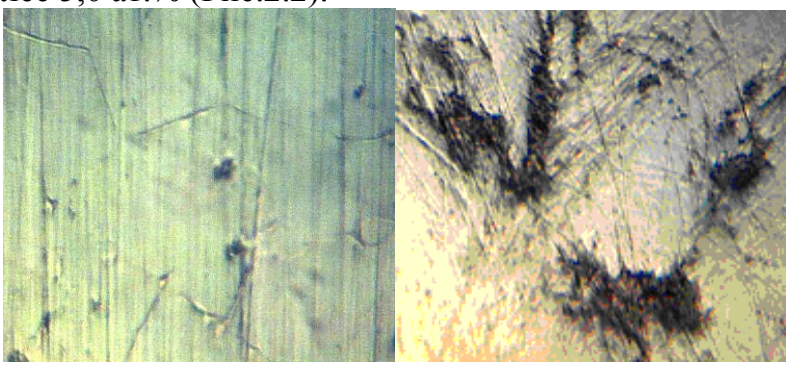


Рис.1.
Диаграмма состояния системы $TlInSe_2$ – Se в области концентраций 0-10,0 ат.% Se.

Микроструктурные исследования сплавов системы $TlInSe_2$-Se показали, что сплавы с содержанием до 5,0ат.% Se однофазны и имеют зернистую микроструктуру (Рис.2.1). Следы эвтектики наблюдаются в сплавах с содержанием Se более 5,0 ат.% (Рис.2.2).



1 2

Рис.2.
Микроструктура сплавов системы $TlInSe_2$ – Se: 1 – сплав состава 5,0ат.% Se; 2 – сплав состава 8,0ат.% Se.

Рентгенофазовый анализ сплавов системы $TlInSe_2$–Se показал, что в сплавах с содержанием 1,0 и 2,0ат.% Se сохраняется структура $TlInSe_2$, однако некоторые рефлексы смещаются в сторону малых углов, что свидетельствует о некоторой деформации тетрагональной решетки $TlInSe_2$. Кроме того, на дифрактограмме сплава с содержанием 4,0ат.% Se, отожженного при 353±5К в течение двух недель наблюдаются новые рефлексы, не относящейся к матричной решетке $TlInSe_2$. Анализ дифрактограммы сплава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ отожженного при 673±5К показал, что дифракционная картина сходна с дифракционной картиной тетрагонального $TlInSe_2$, и некоторое смещение рефлексов в сторону малых углов является следствием температурного расширения. Несколько иная картина дифракции наблюдалось после отжига указанного сплава при температуре 353±1К в течение двух недель. Рефлексы, наблюдаемые на дифрактограмме сплава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$, отожженного при 353±1К, показаны в Таблице. Для сравнения там же представлены межплоскостные расстояния для $TlInSe_2$ [1].

Рентгендифракционные рефлексы тетрагонального $TlInSe_2$ и сплава состава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ имеют некоторую схожесть, однако детальное сравнение выявило заметное их различие. Обнаруженные различия выражаются в изменении интенсивности дифракционных рефлексов, сдвигом некоторых из них и появлением ряда слабых отражений при абсолютно идентичных условиях съемки. Так, в отличие от дифракционной картины $TlInSe_2$ в дифрактограмме сплава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ имеются дополнительные рефлексы со средней и малой интенсивностями при углах дифракции θ=4,38; 5,88; 6,72; 8,75; 13,23; 13,52; 13,80; 14,77; 18,22 и 19,52°. Кроме того, на вид изменение угла дифракции рефлекса с максимальной интенсивностью, для $TlInSe_2$ она наблюдается при 17,12° (202), тогда как для сплава состава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ – она соответствует углу θ =15,82° (004). Естественно, что выявленные дифракционные изменения в твердых растворах $TlInSe_{2+x}$ не соответствуют правилам погасания тетрагонального $TlInSe_2$, кристаллизующегося в пространственной группе I4/mcm. Анализ межплоскостных расстояний и кристаллографические расчеты в различных вариантах определения параметров решетки сплавов $TlInSe_{2+x}$ показали, что структуру образцов указанной системы можно интерпретировать как ромбическую упорядоченную структуру с периодами решетки: a=6,57Å; b=10,08 Å; c=11,28Å. Все обнаруженные различия сплава состава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$, а также результаты ДТА позволили нам рассмотреть структуру сплава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ как новую структурную разновидность $TlInSe_2$.

Индицирование межплоскостных расстояний и отсутствие погасаний среди рефлексов позволил определить симметрию вновь обнаруженной модификации как ромбическую, с пространственной группой P222. При сравнении полученных рентгенографических данных с аналогичными данными некоторых халькогенидов типа $A^2B^3{}_2X^6{}_4$, где A – щелочноземельные металлы; B – Al, Ga; X – S, Se, Te [5-7], структуры которых являются производными структуры TlSe, легко обнаружить аналогию между ними. Например, согласно данным работы [5], соединения $CaAl_2Se_4$ и $SrAl_2Se_4$ кристаллизуются в ромбической структуре – производной структуры TlSe, а $BaAl_2Se_4$ – в кубической структуре с пр.гр. Pa3 типа Th_3P_4, являющиеся также производной структуры TlSe. Отметим, что решетки указанных структур образованы на основе диагонали базисной плоскости решетки TlSe.

Как видно из Таблицы, расчетные данные этой структуры находятся в удовлетворительном согласии с экспериментальными данными межплоскостных расстояний, полученных нами для сплава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ в ромбической варианте структуры. Можно предположить, что избыточные атомы Se, соединяясь с

разными полиэдрами в виде Беловских “шапочек”, увеличивают координационное число крупных катионов.

Таблица

Рентгенографические данные сплава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ и $TlInSe_2$ [1].

Рентгенографические данные сплава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ отожженного при T=353 K							Данные $TlInSe_2$ [1]			
№ п./п.	θ°	$d_{эксп.}$, Å	I / I_0	Ромбическая решетка			θ°	$d_{эксп.}$, Å	I / I_0	h k l
				$d_{расч.}$	Δd, Å	h k l				
1	4,38	10,0650	7	10,0809	0,0159	0 1 0	-	-	-	-
2	5,88	7,5034	6	7,5164	0,0130	0 1 1	-	-	-	-
3	6,72	6,5691	7	6,5752	0,0061	1 0 0	-	-	-	-
4	7,82	5,6496	10	5,6400	0,0096	0 0 2	7,74	5,7098	3	1 1 0
5	8,75	5,0410	6	5,0399	0,0011	0 2 0	-	-	-	-
6	9,61	4,6044	5	4,6016	0,0028	0 2 1	10,97	4,0375	59	2 0 0
7	11,08	3,9999	74	4,0000	0,0001	1 2 0	12,97	3,4235	9	0 0 2
8	12,61	3,5210	7	3,5229	0,0019	0 1 3	13,92	3,1942	32	2 1 1
9	13,23	3,3588	12	3,3599	0,0011	0 3 0	-	-	-	-
10	13,52	3,2881	7	3,2875	0,0006	2 0 0	-	-	-	-
11	13,80	3,2226	22	3,2220	0,0006	0 3 1	-	-	-	-
12	14,77	3,0152	7	3,0137	0,0015	0 2 3	-	-	-	-
13	15,46	2,8837	11	2,8866	0,0029	0 3 2	15,18	2,9361	10	1 1 2
14	15,82	2,8197	100	2,8200	0,0003	0 0 4	15,62	2,8549	54	2 2 0
15	16,44	2,7161	11	2,7157	0,0004	0 1 4	17,12	2,6111	100	2 0 2
16	17,26	2,5908	45	2,5917	0,0009	1 0 4	17,52	2,5535	12	3 1 0
17	17,76	2,5201	28	2,5199	0,0002	0 4 0	20,53	2,1925	24	2 2 2
18	18,22	2,4585	6	2,4594	0,0009	0 4 1	-	-	-	-
19	19,52	2,3006	5	2,3008	0,0002	0 4 2	-	-	-	-
20	20,73	2,1717	15	2,1716	0,0001	1 4 2	22,38	2,0187	8	4 0 0
21	23,03	1,9649	13	1,9650	0,0001	1 2 5	23,48	1,9293	5	2 1 3
22	24,76	1,8354	9	1,8357	0,0003	3 3 0	24,10	1,8826	6	4 1 1
23	25,10	1,8121	34	1,8118	0,0003	3 3 1	25,20	1,8056	19	4 2 0
24	26,13	1,7454	14	1,7455	0,0001	3 3 2	26,23	1,7389	19	4 0 2
25	26,35	1,7306	13	1,7305	0,0001	3 0 4	26,68	1,7117	7	0 0 4
26	27,88	1,6438	7	1,6437	0,0001	4 0 0	27,52	1,6635	5	3 3 2
27	28,88	1,5916	11	1,5912	0,0004	1 5 4	28,81	1,5971	14	3 2 3
28	30,06	1,5346	5	1,5349	0,0003	0 2 7	29,20	1,5759	4	2 0 4
29	30,96	1,4942	11	1,4947	0,0005	1 2 7	31,15	1,4862	2	4 1 3
30	33,02	1,4106	12	1,4100	0,0006	0 0 8	31,58	1,4680	8	2 2 4

Для исследования физических свойств методом направленной кристаллизации были выращены монокристаллы состава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$. Из выращенного монолитного слитка были отколоты образцы в форме прямоугольной пластины с размерами 2,0×2,0×10,0мм^3. Исследуемые монокристаллы обладали дырочной проводимостью и удельным сопротивлением $(1,0\text{-}4,0)\cdot 10^2$Ом·см при комнатной температуре. Измерения электропроводности выполнены на постоянном токе четырехзондовым методом. В качестве контактов была использована серебреная паста. На изготовленных таким образом образцах была исследована температурная зависимость электропроводности σ(T) в трех кристаллографических направлениях в температурном интервале 80÷450K. Кривые

зависимости σ(T) образца состава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ показаны на Рис.3. В отличии от кривых зависимости σ(T) $TlInSe_2$ тетрагональной модификации, где в разных кристаллографических направления имеются два вида кривых, в кривых зависимости σ(T) образца состава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ наблюдаются три хода кривых. Необходимо отметит, что в области температур 85÷280К величина электропроводности образцов $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ в разных направлениях характеризуется почти постоянным значением. В области температур 320÷370К на кривых зависимости σ(T) образца $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ наблюдается Λ-образная аномалия с максимумом при 340÷352К характерное для кристаллов, подвергшихся структурному фазовому переходу. Экстремальное изменение значений электропроводности максимально в направлении осей (010), (001) и минимально в направлении (100). Сравнение полуширин аномалий на кривых зависимости σ(T) и эндотермического эффекта твердофазного превращения сплава состава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ на кривых ДТА показало их удовлетворительное согласие, что позволило интерпретировать аномалию на кривых σ(T) в области 320÷370К как структурный фазовый переход тетрагональный(α) ↔ромбический (β).

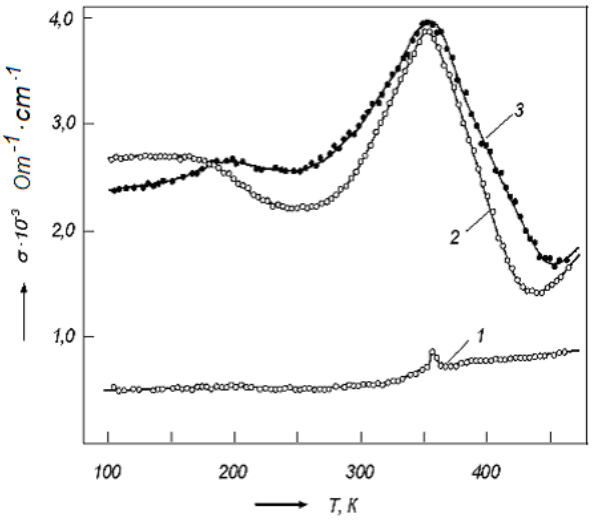


Рис.3.
Температурная зависимость электропроводности образца монокристалла состава $(TlInSe_2)_{0,96}$-$Se_{0,04}$ в направлении кристаллографической оси: 1-[100]; 2-[001]; 3- [010].

Таким образом, проведено комплексное физико-химическое исследование сплавов системы $TlInSe_2$-Se со стороны $TlInSe_2$ и построена диаграмма состояния системы. На основе $TlInSe_2$ обнаружена область растворимости, доходящая при комнатной температуре до 5,0ат.% Se. На термограммах сплавов системы $TlInSe_2$ -Se с содержанием 2,0÷6,0ат.% Se обнаружен и идентифицирован структурный фазовый переход при температуре 363К имеющий максимальное значение термического эффекта для сплава состава $(TlInSe_2)_{0,96}$-$Se_{0,04}$.

С помощью аналитического метода индицирования рентгеновских отражений было установлено, что структура твердого раствора состава $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ соответствует ромбическому варианту структуры. Определена пространственная группа симметрии (P222) и значения параметров решетки вновь обнаруженной модификации: a=6,57(5)Å; b=10,08Å; c=11,28Å. Установлено, что ромбическая модификация $TlInSe_2$ устойчива при температурах ниже 363К и выше указанной температуры превращается в тетрагональную модификацию (I4/mcm).

1. V.D.Muller, G.Eulenberger, H. Hahn, *Z.anorg. allgem. Chem.,* **398** (1973) 207.
2. Р.М.Сардарлы, А.П.Абдуллаев, Г.Г.Гусейнов, А.И.Наджафов, Н.А.Эюбова, *Кристаллография,* **45** (2000) 606.
3. А.И.Наджафов, Г.Г.Гусейнов, О.З.Алекперов, Р.М.Сардарлы, А.П.Абдуллаев, Н.А.Эюбова, *Кристаллография,* **53** (2008) 864.
4. S.Kashida, K.Nakamura, S.Katayama, *Solid St. Commun.,* **82** (1992) 127.
5. W.Klee, H.Schäfer, *Z.Anog. allg. Chem.,* **479** (1981) 125.
6. W.Klee, H.Schäfer, *Z. Naturforsch.,* **33b** (1978) 829.

7. Г.Г.Гусейнов, Ф.Х.Мамедов, И.Р.Амирасланов, Х.С. Мамедов, *Кристаллография,* **28** (1983) 866.

$TlInSe_2$ KRİSTALLARINDA POLİMORF FAZA KEÇİDİ VƏ FAZALARIN ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİ

O.Z.ƏLƏKBƏROV, A.İ.NƏCƏFOV, Q.Q.HÜSEYNOV, A.P.ABDULLAEV

$TlInSe_2$-Se sistemi əritiləri differensial-termik, rentqenfaz və mikroququluş analizi üsulları ilə tədqiq olunmuş və sistemin $TlInSe_2$ birləşməsi yaxınlığında hal diaqramı qurulmuşdur. $TlInSe_2$ birləşməsi əsasında selenin, evtektika temperaturunda 8,0ат.%, otaq temperaturunda isə 5,0 ат.% miqdarında həllolma sahəsinin oduğu aşkar edilmişdir.

2,0÷6,0ат.% Se tərkibli ərintilərin termoqramlarında 363K temperaturda struktur-faza keçidinin olması müəyyən edilmiş və bu keçidə müvafiq termik effektin $(TlInSe_2)_{0,96}$-$Se_{0,04}$ tərkibli ərintidə maksimal olduğu aşkar edilmişdir. Rentgenoqrafik təddiqat nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, T<363K temperaturlarda $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ tərkibli bərk məhlul rombik quruluşda kristallaşır. $TlInSe_2$-Se sistmi bərk məhlullarında $TlInSe_2$ birləşməsinin yeni aşkar edilmiş polimorf modifikasiyanın fəza simmetriya qrupu (P222) və qəfəs parametrləri müəyyən edilmişdir: a=6,57Å; b=10,08Å; c=11,28Å. Müəyyən edilmişdir ki, rombik modifikasiya T=363K temperatura qədər davamlıdır və yuxarı temperaturlarda tetraqonal (I4/mcm) modifikasiya çevrilir.

POLYMORPHIC TRANSITION IN $TlInSe_2$ CRYSTALS AND ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF PHASES

O.Z.ALEKPEROV, A.I.NAJAFOV, G.G.GUSEINOV, A.P.ABDULLAYEV

Using methods of differential-thermal, X-ray and microstructure analysis of $TlInSe_2$-Se alloys are studied from the side of $TlInSe_2$ and the state diagram of the system has been constructed. The region of solubility reaching up to 8,0at.% at eutectic temperature and 5,0at.% Se at room temperature has been established.

Solid-phase transition at temperature 363K having the maximum value of thermal effects for alloy of content of $(TlInSe_2)_{0,96}$-$Se_{0,04}$ has been detected on thermograms of alloys of $TlInSe_2$-Se system with content of 2,0÷6,0at.% Se.

Annealing samples of solid solutions $TlInSe_2$-Se at temperature 353K leads to the ordered structures based orthorhombic $TlInSe_2$. By using the analytical method of indexing of X-ray reflections, there has been established that the structure of solid solution of content $(TlInSe_2)_{0,96}Se_{0,04}$ at T<363K corresponds to the orthorhombic version of the structure. The space group as (P222) and values of lattice parameters of orthorhombic modification is determined as a=6,57Å; b=10,08Å; c=11,28Å. It has been established that the orthorhombic modification $TlInSe_2$ has been stable at temperature smaller than 363 K but at greater temperatures has been gradually transformed to the tetragonal modification (I4/mcm).

Редактор: А.Халилова

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

У ИСТОКОВ ФИЗИЧЕСКОЙ НАУКИ

Н.Б.СОЛТАНОВА

Институт физики НАНАзербайджана
AZ 143, Баку, пр, Г.Джавида, 33

В данной работе рассматривается средневековый период в истории науки - Ренессанс Востока, плодами которого пользовался без ссылок Запад, строя Ренессанс Запада, создавая туман и темную полосу для средневекового периода. Бахманйар ал - Азербайджани - мудрый ученый из ряда корифеев Средневекового Востока. Анализируя труд Бахманйара "Ат -Тахсил ", мы видим ряд решенных задач и проблем физики, которые опередили Запад на столетия.

“Не будь Востока, не было бы Запада”
(Г.В.Гегель)

Мы живем в цивилизованном обществе. Для развития цивилизации необходимо ее правильное понимание, совместное использование ее достижений и признание их в качестве нашего общего человеческого наследия . Скорость научно-технического развития с начала XX в. достаточно увеличилась. Физика здесь является основным руслом. Чем быстрее совершается смена научных событий, тем большее значение приобретает исторический элемент в их изучении. Мы стоим на плечах прошлого. По словам известного советского физика Я.Г.Дорфмана “...физика перерабатывает и использует два вида информации – о новейших результатах научных исследований и об истории развития физических знаний”. [13] Корни физики лежат в глубокой древности. Элементы физики появились в странах шумеро- вавилонской и египетской культуры, зачатки физических учений в странах Юго-Восточной Азии, появление и развитие физических учений в античных Греции и Риме, зарождение новых физических учений в эпоху Средневековья на Востоке и их развитие в эпоху Возрождения на Западе – это путь развития физики. Это общее достояние Человечества.

Преемственные связи между Древним Востоком и Древней Грецией, Древней Грецией и Средневековым Востоком, Средневековым Востоком и Ренессансом Запада сильны. Академик А.О.Маковельский отмечает ,что Демокрит- “первый энциклопедический ум среди греков”- с целью расширить свои знания, совершил длительные путешествия по восточным странам, таким как Египет, Эфиопия, Финикия, Персия, Мидия, Халдея, Индия. [5] Ученый изучал в Египте математику, в Вавилонии астрономию, в Мидии он проявил большой интерес к науке магов. Известны также путешествия Фалеса, Пифагора, Солона, Платона и других ученых в страны Востока, общение их с местными учеными и мыслителями.

Во всех трудах ученых Средневекового Востока делаются ссылки на научные идеи и труды ученых античного периода. [6] Труды античных ученых были распространены в ряде стран Ближнего и Средного Востока, в том числе и в Азербайджане.

Современные ученые, рассматривая историю науки, освещают античную эпоху, мимолетом говорят о Средневековом Востоке и гремучим голосом выносят на пъедестал почета Ренессанс Запада. Необходимо уделить особое внимание той самой мало освещенной эпохе (период Средневекового Востока), где находится база, фундамент современной науки.

Наука не принадлежит какой-либо этнической рассе или религиозной группе. Это эволюцинный прогресс, который создан представителями самых различных народов и расс, и всегда будет прогрессировать.

Историк Роберт Бриффольт писал: “... то, что мы называем наукой возникло в результате новых методов экспериментирования, наблюдения и измерения, которые были введны в Европу мусульманами. Современная наука базируетия на традициях исламской цивилизации”. [5]

В период триумфа мусульманской цивилизации (VII-XVI в.в.) мир был свидетелем большого развития в области искусства и науки. Это тот самый Средневековый Восток. В результате молниеносного территориального расширения Халифата, мусульманские мыслители унаследовали знания почти всех существующих в прошлом крупных цивилизаций: Древнего Египта, Вавилона, Греции, Персии, Индии. Они перевели наследие этих цивилизаций на арабский язык. Особенно при Халифе ал-Мамуне (813-833) увеличилось число переводов. В 832 г ал-Мамун создал школу под названием “Дом науки” (“Дом мудрости”), где были все условия для переводов и переводчиков древних трудов. Таким образом научное наследие, трактаты, историческая и научная информация были сохранены, спасены от исчезновения. “Дом мудрости” можно назвать Академией наук того времени. Ученые не только изучали и старались сохранить знания древних, но и развивали их, пополняя сокровищницу знаний Человечества новыми познаниями в области философии , математики, астрономии, химии, физики, медицины. Университеты Ирака, Сирии, Египта, Испании, Ирана и т.д. стали крупными мировыми учебными центрами, куда студенты стекались со всей Европы для получения образования. По словам замечательного английского востоковеда У.М.Уотта-“Наука, созданная народами мусульманского Востока, оставалась на высоком уровне по крайней мере до XVII в.”. [10] Научное наследие Средневекового Востока заложило основы для прогресса науки и технологии в Европе. Член-корр. АНСССР Е.Э.Бертольс писал: “Если вспомнить, что в истории европейской культуры период IX-XIII в.в представляет собой время глубочайшего упадка, то нельзя не прийти к выводу, что имено труды восточных философов вывели европейские народы из тупика и указали им путь дальнейшего развития”. [8] Рукописи средневековых авторов, написанные на арабском и фарсидском языках сегодня хранятся в известных рукописных фондах, фундаментальных библиотеках и университетах мира (Дрезден, Лейпциг, Лондон, Берлин и т.д). Многие из этих рукописей были несколько раз переписаны, переведены на европейские языки, изданы и переизданы. [4,9] Эти моменты какраз-таки говорят о том, что упоминать мимолетом Средневековый Восток не справедливо.

Средневековый период в истории науки требует того же внимания каковое к античному периоду и Ренессансу Запада. Эта темная полоса требует яркого освещения. Правда, исследователи истории науки делают на этом пути определенные работы, но этого пока мало. К большому сожалению, ученые Запада в своих трудах почти не делали ссылок на использованный материал, полученный из трудов ученых Востока. Эта больная точка в истории науки позволяет оставлять темную полосу. Мы обязаны осветить эти малоосвещенные , забытые моменты в истории развития науки.

Азербайджанский народ является наследником древних кура-араксинской, эллинистической, скифской и других цвилизаций, бытовавших на его земле и в его регионе. В силу ряда объективных причин (географическое положение, природные богатства) на протяжении всей своей истории Азербайджан экономически, политически и культурно был тесно связан со странами и народами, представлявшими различные древние, средневековые и более поздние, подчас-очень высокие цивилизации, и культура развивалась в непосредственной связи с этими культурами, что последнее явилось одним из значительных факторов, определявших высокий уровень Азербайджанской многоязыкой и многорелигиозной культуры. Единая азербайджанская культура и ее

мировоззренческая основа-азербайджанская философия создавалась на этом общекультурном фоне.

Средневековый период в истории научно-философской мысли Азербайджана являлся достаточно плодотворным. В этот период жили и творили такие мыслители как Исмаил сын Йасара, Муса Шахават, Абулхасан Ахмед сын Омара Бардаи, Абубакр Макки сын Ахмед Бардаи, Абулхасан Али сын Харуна Занджани, Абулхасан Бахманйар, Шихабаддин Марагаи, Абусаид Урмави, Шамсаддин Хосровшахи Табризи, Афзаладдин Хагани, Сираджаддин Урмави, Насиреддин Туси, Камаледдин Ардебили, Хагани Ширвани, Фалаки Ширвани, Низами Гянджеви, Махаммед Физули, Камаледдин Масуд Ширвани, Махаммед Нахчывани, Шихабаддин Абухафс Омар Сухраверди и другие. [12] Среди этих творцов поэты-мыслители-философы, создавшие блестящие художественные произведения, вошедшие в сокровищницу мирового искусства, профессиональные философы-естествоиспытатели, которыми написаны ценные произведения по философии, логике, естествознанию и другим наукам, труды которых не стареют по сей день.

Продолжатель философии и физики Аристотеля (384-322 до н. э.), ученик великого ученого-энциклопедиста Ибн Сины (980-1037) Абу-л-Гасан Бахманйар ибн ал-Марзбан ал-Азербайджани (993-1066) сделал свой вклад в развитие научно-философской мысли. Он один из крупных представителей восточного перипатетизма (философское учение, считающее бога началом, находящимся не за пределом сущего, а тождественным с ним). Бахманйар был зороастритом, потом принял ислам. Он виднейший ученик и последователь Ибн Сины (Авиценны), который писал о Бахманйаре: “Он мне любим как сын и даже больше. Я дал ему образование, воспитание и довел его до такого уровня”. Обращаясь к Ибн Сине, его называли Шейх Раисом. В письмах Ибн Сины и Бахманйара, сохранивщихся в санкт – Петербурге, Ташкенте, Милане, при обращении Ибн Сины к Бахманйару высокое уважение к своему ученику отмечается словами “Мевлаки вариси”, на персидском языке это звучит как “Кийа Раис”, что означает господин и глава. Это словосочетание стало почетным призванием Бахманйара. [11]

В историко-биографической энциклопедии XII в, сочинении ал-Байхаки “Татимма “Сиван ал-хикма” ” (“Дополнение к “Хранилищу мудрости””) собрана информация об ученых- философах, врачах, астрономах, математиках, творивших в X-XII в.в. В этом энциклопедическом справочнике Бахманйар отмечен как известный философ и мудрец Абу-л-Хасан Бахманйар ал-Марзубан – ученик Абу Али Ибн Сины. Автор пишет : “Большинство научных трудов Ибн Сины составляли предмет исследований и Бахманйара. Бахманйар обладал даром, проникал в суть вещей... Из мудрых изречений Бахманйара: “Капитал охраняемое, а разум- его хранитель, разум стремится к познанию, правдивость- возлюбленная мудрых.”” [1]

По словам Бахманйара ал – Азербайджани: “Всякая передача знания и его получение осуществляется на основе предшествующего знания, но предшествующего не во времени, а по сущности.”. [14]

Научная и преподавательская деятельность Бахманйара сыграла свою роль в развитии философии и науки. Одним из продолжателей и учеников Бахманйара был Абу-л-Аббас ал-Лавраки, от которого философские науки распространялись в Хорасане.

Исследователь философии средневекового Ирана А.Корбэн в своем труде “La philosophie iranienne islamique aux XVII et XVIII siecles”.(Paris, 1981) отмечает роль Бахманйара в истории философской мысли народов мусульманского Востока. Созданные им труды, вместе с сочинениями его учителя Ибн Сины и ученика ал-Лавраки, служили авторитетным источником научных знаний на протяжении ряда столетий – вплоть до Нового времени, что отмечается, в частности А.Корбэном [3].

Известный просветитель Шихаб ад- Дин ал- Марджани (1818-1889) во II т. своего фундаментального труда о деятелях науки и культуры, представлявших цивилизацию мусульманского мира в VII-XIX в.в., Бахманйар характеризуется как “один из самых стойких единомышленников Шейха Раиса (Ибн Сины) в философских науках, превосходивший других изощренностью ума, проницательностью мысли, писательским мастерством, основательностью и тщательностью исследований.” В вводном томе того же труда об ученых он пишет: “Крупнейшими и самыми великими среди них Абу Наср ал- Фараби, Абу Али Ибн Сина, кадий Абу-л- Валид Мухаммад ибн Ахмад Ибн Рушд и Бахманйар ибн ал-Марзбан”. [2,7] О почетном месте, отводившимся этим ученым, Бахманйару, в истории арабо- мусульманской философии, свидетельствует перечень ее наиболее знаменитых представителей, которых мы находим в изданном больше ста лет тому назад труде.

Для уяснения философских и естественно – научных взглядов как Ибн Сины, так и Бахманйара, большую ценность представляют входящие в список произведений Абу Али “Совместные обсуждения” и “Объяснения”, отражающие содержание бесед, которые вели между собой учитель и ученик, обсуждая вопросы метафизики, физики, логики, психологии. Причем, “Объяснения” сохранились в записи самого Бахманйара. До сих пор в Рукописном фонде Института востоковедения Узбекистанской А Н хранится письмо “Вопросы, заданные Бахманйаром и ответы, данные Шейх Раисом Ибн Синой ”, где обсуждаются основные научные вопросы того времени- материя, форма, движение и т. д.. [2]

Дошедшие до нас труды Бахманйара написаны на арабском языке. Среди них “Познание”, “Украшение”, “Радость и счастье”, “Книга музыки”, “Метафизика”, “Иерархия существ” и другие. Эти произведения, труды хранятся в библиотеках и рукописных фондах Станбула, Ватикана, Тегерана, Бейрута, Каира, Лейдена, Лондона и.т.д.. Позже они стали переводиться как на восточные (персидский), так и на европейские языки. В 1851 г “Метафизика” и “Иерархия существ” были изданы в Лейпциге на немецком и арабском языках. Саломон Попер, переводчит труда на немецкий язык, в введнии отмечает, что перевод сделан с арабского оригинала. Автор перевода приводит сравнения нескольких переписанных рукописей этих работ, отмечается имеющаяся разница между рукописями одной и той же работы.

Арабские оригиналы “Иерархии существ” и “Метафизики” Абу-л- Гасана Бахманйара были изданы в 1911г также и в Каире (Египет. Издательство “Курдистан”). Лейпцигское и Каирское издания почти не отличаются друг от друга. Коронным трудом Абу-л- Гасан Бахманйара ибн ал-Марзбан ал- Азербайджани считается трактат “Ат- Тахсил”(“Познание”). Эта энциклопедическая работа содержет в себе 3 книги: I- “О логике”, II- “О науке именуемой “Метафизика””, III –“О конкретно существующих вещах”. В 1971 г. в Тегеране издана работа “Китаб ат-Тахсил” на арабском, в 1983г. – на персидском языках. Этот трактат был переведен на русский язык известным востоковедом А.В.Сагадеевым и издан в Баку под редакторством академика Г.Б.Абдуллаева в 1983-1986г.г. в трех томах.

Бахманйар в своем труде освещает ряд вопросов, относящихся к предмету физика:

1. Строение вещества; опровержение утверждения о том, что тело состоит из неделимых частиц.
2. Движение и покой. Виды движения по природе и траектории.
3. Пространство и время ,их особенности.
4. Световые явления , природа солнечных лучей и механизм созерцания.
5. Звуковые явления; процесс происхождения, распространения, восприятия звука.

В первой книге Бахманйар дает интересные определения понятиям точки, линии, плоскости, времени, движения и т.д. По Бахманйару “Непрерывное количество может быть тем, у чего есть какое- то соединение и устойчивость, и на каждую часть чего можно указать, (обозначив) его “где” по отношению к другой (части).

Из непрерывного количества одно допускает деление в одном направлении- такова линия, другое- в двух направлениях, пересекающихся под прямым углом, - такова плоскость, третье – в трех направлениях, перпендикулярных друг к другу,- таково тело. Что касается непрерывного количества, лишенного положения, то это – время. Время есть мера движения и оно относится к непрерывному количеству, но лишено положения, поскольку части его, а именно прошлое и будущее, вместе не существуют”. [14]

Бахманйар в этой же Главе говорит о движении:
“Движение ... есть пребывание движущегося предмета в промежутке между началом и концом, когда у него нет ни того, что было прежде, ни того, чему предстоит быть потом. ... Пребывание в движении и является самим движением. Движение же есть изменение.” [14]

Говоря о движении Бахманйар определил его в форме изменения. Отмечая интуицию, мышление, мудрость он указывает опять на движение. “ Интуиция – это движение души ... это быстрый переход от известного к не известному. Сооброзительность – это предрасположенность к интуиции”. “Мышление – это движение ума человека к началам вопросов с тем, чтобы двигаться от них к самим вопросам ”. “Мудрость – это достижение душой человека возможного для него совершенства в отношении знания и дела.” [14]

В главе “Об обретении посылок” Бахманйар рассматривает ряд проблем, куда входят также вопросы оптики. “Зрячие... становятся способны видеть окружающее только при наличии света.” Говоря о лунном затмении, он пишет: “Земля иногда занимает промежуточное положение между Луной и Солнцем, а у всякого (светила), получающего свет от Солнца, свет исчезает, когда Земля занимает промежуточное положение между ним и Солнцем. ... Светило, у которого свет исчезает, затмевается. Луна затмевается.” Луна ночью для человека была в образе светила. Бахманйар же здесь тонко отмечает, что “у всякого (светила), получающего свет от Солнца, свет исчезает ...”. То есть Луна не светило, она получает свет от Солнца.

10 глава I–ой части II книги написана под названием “Об опровержении утверждения, что тело состоит из неделимых частиц”, где идет изложение нескольких вариантов опровержений отмеченного утверждения. Бахманйар в XI веке приходит к весьма удивительному заключению, что частицы (атомы), из которых состоит тело, сами делимы. Действительно, научные открытия XX века (модель атома Резерфорда – Бора) показали, что атом делим – он состоит из положительно заряженных протонов,отрицательно заряженных электронов и не заряженных нейтронов. Как видим предсказание Бахманйара о том, что тело не может состоять из неделимых одинаковых частиц подтвердилось.

Во II книге исследуется проблема о первоматерии, материи, форме. “... форма первее первоматерии. Телесная форма есть актуальность, потенция бытия же ее – в материи. Материя актуализируется благодаря форме, а посему бытие первичным образом оказывается у формы и вторичным – у материи.”. “...Нет ничего невозможного в том, чтобы единое в общем смысле, как в данном случае абсолютная форма, сохраняло свою общность в качестве единого по числу благодаря другому единому по числу, как нечто сопричастное ему. В данном случае это есть начало, наделяющее актуальным бытием нечто единое по числу, а именно первоматерию, посредством общей формы.”. “...Следует знать, что

материальная форма никогда не существует отрешенно от материи.”. “...положение и величина представляют собой неотъемлемые признаки тела”. [14]
В о Второй части II книги имеется глава под названием “О количестве”, откуда можно получить информацию о понятии непрерывного и прерывного, что такое положение и место.

“Количество делится на два разряда: непрерывное и прерывное. ... Непрерывное количество бывает четырех разновидностей. Во – первых, это линия, то есть воображаемый след от движения неделимого предмета в каком – то направлении. Далее, это плоскость, то есть воображаемый след движения линии в направлении, отличном от направления вышеупомянутого движения. Далее, это тело, то есть воображаемый след от движения плоскости вверх или вниз. Далее, это время ,то есть число движения согласно предшествованию и следованию. Время не относится к количествам, имеющим положение, ... у времени нет двух устойчивых соседствующих частей . ... Прерывное состоит из делимого, делимое – из неделимого, неделимое – из единиц.” [14]

“Положение – это соотношение частей тела друг с другом, из которого явствует, где они находятся одна по отношению к другой. ...место – это предел объемлющего тела, который охватывает объемлемое тело ...”. Главу “О месте” Бахманйар начинает предложением : “Данный вопрос обычно рассматривается в физике, поскольку он относится к этой науке. ... Под “местом” может подразумеваться то, что объемлет тело, или то, в чем тело пребывает неподвижно. ... И еще: что касается места, то движение бывает в нем, а что касается формы и первоматерии, то движение бывает с ними ...”. Дальше в этой главе рассматривается пустота (вакуум). У Бахманйара были своеобразные взгляды на проблему вакуума: “...пустота есть количество, обладающее положением. ... пустота есть тело. ... в пустоте не может быть никакого движения – ни прямолинейного, ни кругового. ... В пустоте не может быть естественного движения; а раз в ней не может быть естественного движения, то там не может быть и насильственного движения. ...Кроме того, в пустоте не может быть покоя. ...покоящееся – это то, что не движется, но чему свойственно двигаться. Значит, и покоящееся в пустоте – это то, что не движется, но чему свойственно двигаться в ней. Пустота же не такова, чтобы что – то могло в ней двигаться. ” Так он вообше отрицает возможности появления движения и в особенноси насильственного движения в вакууме. Он пишет,что для появления насильственного движения необходимо постороннее действие. Так как в вакууме невозможно наличие посторонного предмета, то невозможно и насильственное движение. Это логическое заключение делалось в то время, когда не были известны законы сохранения импульса.

Движение – это актуальная проблема тех времен, Бахманйар подходил к данной проблеме очень тонко и со всех сторон. О движении он говарит во II и III томах. “Естественное движение – это то, которое совершает тело, оставленное при своей природе, а насильственное движение происходит тогда, когда тело приводится в движение в направлении, отличном от того, которого требует его природа, как, например, когда кто – то придает камню движение вверх.”

В главе “ О времени ” автор пишет: “...время есть число движения. ...не было бы движения – не было бы и времени ...Оно (время) должно служить мерой для безначального и беспрерывного движения. И именно такова форма кругового движения, посредством которого измеряются величины других движений. ...”

III том книги “Ат – Тахсил” (“Познание”) идет под названием “О конкретно существующих вещах”. Предмет науки “о конкретно существующих вещах” у Бахманйара соответствует предмету физики в энциклопедических трудах Ибн Сины. III книга состоит из двух частей: Часть первая, Часть вторая: I раздел – 8

глав, II – 4 главы, III – 7 глав, IV – 15 глав. Первый раздел (8 глав) Бахманйар назвал книгой “Физики”.

По словам Бахманйара “природа тела – это то, что служит началом для присущего ему самому изменения или покоя. Форма тела – это есть суть бытия, благодаря которому оно есть то, что есть. Материя тела – это нечто такое, что выступает в качестве носителя формы.”. Бахманйар в книге “Ат – Тахсил ”пишет, что “все, что образуется в качестве тела, говорю я, уничтожается, а все, что уничтожается, возникает.”

В первой главе Второго раздела автор пишет: “... фигуры простых естественных тел должны быть простыми, т. е. сферическими...” Дальше Бахманйар утверждает: “Знай: земля требует для себя сферической фигуры ...”
Бахманйар считает, что “тела приходят в движение исключительно для того , чтобы вернуться в естественное состояние. ...Где бывает усиление стремления, там у движения должна быть цель, по достижении которой наступает покой. ....прерывные прямолинейные движения должны завершаться покоем. ... Состояние покоя измеряется временем.”

С точки зрения Бахманйара, механическое движение различается как по траектории – прямолинейное, криволинейное, так и по природе – естественное (равномерное) и насильственное (ускоренное). При этом Бахманйар приходит к логическому заключению, что прямолинейное движение бывает как естественное, так и насильственное. Однако, криволинейное движение и может быть естественным заключает он. По Бахманйару “естественное движение – то, которое происходит от силы в теле, направляющемся к обусловленной его природой цели и соответствующим его природе способом, когда ему ничто не препятствует. Движение, осуществляющееся насильственно, - то, при котором движущее находится вне движущегося и которое не соответствует природе тела.” Бахманйар пишет: “Всякое движение, не являющееся прямолинейным, не является и естественным. ” В то время как Аристотель считает вращательное движение (например, движение небесных тел) – естественным и вечным.

“...то, к чему направлено круговое движение, тождественно точке, от которой происходит удаление.”

Если считать, что небесное тело состоит из земного вещества, то согласно послегалилеевской физики, его естественное движение состоит из движеня по прямой линии с постоянной скоростью. Поэтому, чтобы заставить тело вращаться по кругу, к нему необходимо приложить силу.

Впервые в аналитической форме значение и направление центростремительной силы определил голландский физик Христиан Гюйгенс, что и легло в основу созданной Исааком Ньютоном теории движения планет. Проблема движения планет, занимавшая умы древних греков, астрологов Халдея и Вавилиона, создателя геоцентрической системы Коперника и, наконец, Великого Галилея, превратилась во время Ньютона в прикладную научную задачу. Она стала идеальной областью для применения законов Ньютона, и, можно сказать, что решение проблемы движения планет с помощью теории Ньютона было высшим достижением наук XVII века и “Естественное и вечное”,по Аристотелю, движение планет оказалось требующим некоторой силы. Логически чувствуя эту научную закономерность, еще в XI веке Бахманйар в книге “Ат-Тахсил” писал: “...Круговое движение может существовать лишь потому, что есть какая – то причина ...у небесного кругового движения есть начало, отрешенное от материи, телесная сила, представляющая себе частные предметы, сила, связанная с желанием , и движущая сила.”

Говоря о движении Бахманйар выразил еще и такую мысль: “...существуют три разновидности движения: одно – вокруг середины, другое – от середины, третье – к середине”, где ясно есть елементы центростремительной силы.

В результате своих исследований Бахманйар приходит к заключению, что во Вселенной единственным движением является вращательное и тем самым делает новое предположение о свойствах пространства и времени. Бахманйар пишет: “...Коль скоро ты знаешь о конечности измерений, из всего вышеизложенного тебе должно быть понятно, что движения прямолинейного и уходящего в бесконечность, не бывает”. Из этого заключения становится так же зримым искривления пространства.

Известно, что с глубокой древности до XIX – века в мировой науке господствующее положение занимала геометрия, связанная с именем выдающегося греческого философа и математика Евклида. В одном из постулатов его говорится, что в данной полоскости , через данную точку можно провести только одну прямую, параллельную данной прямой.

В XIX веке были созданы две системы неевклидовой геометрии. Первая – это геометрия, связанная с именем выдающегося русского математика Лобачевского, по мнению которого через данную точку можно провести множество прямых параллельных линий. Вторая – римановская геометрия – есть геометрия сферы. В этом случае нельзя провести ни одной прямой, параллельной данной.

Длительное время не могли определить, в каком пространстве мы живем – евклидовом или неевклидовом .

Пространство в теории тяготения Ньютона носит евклидовый характер, т. е. предполагается наличие абсолютных прямых линий. Однако в общей теории относительности, созданной Эйнштейном в начале XX века, показано, что пространство носит неевклидовый характер – все линии являются замкнутыми и отсутствуют абсолютные прямые линии.

Уравнения Эйнштейна в общей теории относительности устанавливают связь между распределением материи и геометрическими свойствами пространства и времени – частицы и поля, находясь в пространстве, искривляют его. То есть, искривленные просранство и время, являются символом общей теории относительности. Бахманйар еще в XI веке принимает наличие кривизны пространства, он не приемлет понятия безконечности. Он пишет “...бесконечное имеет природы небытия”. Далее, анализируя явление происхождения движения под действием силы в промежутке времени в главе “О том, что действие любой телесной силы конечно” Бахманйар пишет, что “Одна сила ... отличается от другой в нескольких отношениях: по скорости действия, по продолжительности действия.” И, он логически развивает вышеизложенное предположение:

“...Понятно поэтому, что для приведения в насильственное или естественное движение ни одно тело не может располагать силой бесконечной интенсивности, поскольку для этого требовалось бы, чтобы его действие протекало во времени, тогда как движения, осуществляющиеся не во времени, невозможно, а оно должно было бы осуществляться именно не во времени, ибо чем интенсивнее сила, тем короче отрезок времени”. Таким образом с точки зрения Бахманйара при бесконечной силе двигателя время равнялось бы в пределе нулю, т. е. движения не было бы совсем. Это выдающееся научное изречение, сказано Бахманйаром в XI веке.

Третий раздел 4 глава идет под названием “О лучах, о свете и о том, что с этим связано”. В этой главе рассматриваются вопросы, связанные с проблемами оптики: что представляют собой солнечные лучи, светящееся тело, отражение световых лучей, механизм созерцания и т.д. .

Световые явления и механизм созерцания интересовал людей с очень глубокой древности. Знаменитый греческий геометр Евклид, живший около 300 лет до н.э.,строил свою оптику на представлениях, что будто бы прямолинейные “зрительные лучи” исходят из глаз наблюдателя, а не из видимого им предмета. Притом эти лучи представлялись как сплошное тело. Глаз как бы “ощупывает” все предметы с помощью “зрителъных лучей”. Эту мысль защищали Платон и Аристотель. Решительно возражая против такой трактовки, Бахманйар писал: “...Абсурдность этого предположения очевидна. Ибо не может быть так, чтобы от органа зрения исходило какое – нибудь сплошное тело, которое бы, заполняя полмира, доходило до сферы неподвижных звезд, после чего, при смыкании век, возращалось к нему обратно, а затем, когда веки откроются вновь, чтобы от него исходило такое тело, как если бы это зависело от намерения моргающего человека”. Раскрывая механизм созерцания человеческого глаза он пишет: “...Восприятие (зрением) осуществляется благодаря превращению, претерпеваемому органом зрения, когда его достигает созерцаемое. Однако сам созерцаемый предмет достигать его не может, ввиду чего указанное превращение вызывается тем, что в органе зрения проявляется образ созерцаемого предмета”. Далее Бахманйар связывает появление изображения “льдообразной влагой” (современное понятие – “стеклообразное вещество” – хрусталик) и зрительным духом (сетчаткой). Такое объяснение близко к современному. [4]

Что касается природы солнечных лучей, то Бахманйар их не считает телами, так как, в этом случае, от Солнца ничего бы не осталось. Развивая свою мысль в этом направлении, он пишет: “...Далее, если бы исхождение света от Солнца обусловливалось исхождением от него этих тел, то оно должно было бы уменьшаться или от него вообще ничего не должно было остаться”. В то время, когда еще не были известны законы термоядерной реакции, Бахманйар, развивая свое научное мышление стремится создать логическое научное заключение. Хотя он писал, что ему не понятны тепловые явления: “...Но ведь мы не знаем также и того, почему при трении одно тело нагревает другое, и того, почему щепка загорается при приближении к ней огня”. Следует отметить, что сущность тепловых явлений была раскрыта только в конце XVIII века, после известных опытов графа Румфорда.

В главе “О несостоятельности некоторых суждений, касающихся отражения лучей от зеркала” автор разъясняет процесс отражения световых лучей. “...причиной отражения служит гладкость. ...если источник света направляет лучи по природе, то они изменяют свое направление лишь под влиянием насильственно действущего фактора. ...Любая гладкая поверхность выступает причиной передачи какого – либо отображения. ...луч в одних случаях отражается от воды, а в других проникает в ее глубину. ”

Бахманйар отмечает: “...когда есть светящееся тело, а напротив него находится тело, способное освещаться, ..., и когда между ними имеется прозрачное тело, тогда светящееся тело предрасполагает данное тело к принятию этой акциденции ...от источника акциденции и форм. После этого тело, принявшее свет, может передавать его другим телам ...” Бахманйар также рассматривает механизм зеркального отображения. По Бахманйару: “То, что передает отображение, должно находиться на прямой линии, соединяющей наблюдателя и наблюдаемый предмет, ибо по прямой передается (изображение) самого предмета, а не его отображение, между тем как то, что передает отображение предмета, обязательно должно отсутствовать на параллельных прямых, тянущихся между ним и наблюдателем.” Дальше Бахманйар говорит: “Зажигательное зеркало вызывает горение потому, что внутри него имеется точка, в которой свет собирается со всех сторон, вследствие чего эта точка оказывается самой яркой из всех частей зеркала и вызывает

возгорание. ...жгут лучи, отраженные в (зажигательном) зеркале: если бы причиной зажигания было не излучение Солнца, а его тепло, то предметы, расположенные ближе к нему, были бы теплее, а между тем мы видим, что при падении лучей на какую – то вещь, та зажигается, в то время как предметы, находящиеся выше нее остаются очень холодными ...". Говоря о цвете Бахманйар считает, что "цвет возникает актуально благодаря света".

В V главе под названием "О вкусе, обонянии и слухе" Бахманйар, анализируя отмеченные физические чувства человека, дает интересные определения звуковому механизму и самому звуку. "Звук, не есть нечто существующее само по себе и устойчивым образом, ...он возникает при ударе и разрывании чего – то, не от всякого удара и разрывания, а от такого, при котором воздух с силой приводится в интенсивное движение. Но звук – это не сам удар и не само разрывание...

Звук есть явление, возникающее от описанного движения, и причиной его служат удар и разрывание. Когда колебания воздуха или воды доходят до слухового канала, в полости которого заключен застоялый воздух, они вызывают в нем колебательное движение. Сзади в ухе находится перепонка, по которой стелется чувствительный к звуку нерв, который и воспринимает его.
...слыша звук, мы воспринимаем и направление, откуда он исходит.

...Звук есть нечто возникающее от колебания текучего влажного тела, такого, как воздух или вода, которое оказывается сжатым между двумя соударяющимися и сталкивающимися друг с другом телами.".

Говоря о явлении "эхо" Бахманйар пишет: "когда это колебание сталкивается с каким – нибудь препятствием, таким, как гора или стена, и отражается им, он опять же должен оказаться сжатым между колебанием, устремляющимся, чтобы удариться об стену или гору, и тем, обо что ударяется другой воздух и от чего он отражается, отскакивая под его давлением назад и принимая фигуру первого. ...эхо есть у каждого звука, хотя его и не слышно, подобно тому, как у любого света есть отражение."

Бахманйар в своей работе рассматривает также и проблемы о смеси и сопутствующих ей вещах. "...Знай: особой причины, препятствующей одновременному существованию в теле, допустим, теплоты и холода, не бывает. ...смесь бывает прочной и непрочной ...для прочности и непрочности смеси должна существовать причина, предшествующая смеси, и этой причиной является не смесь, а субстанция предмета, ибо смесь следует за прочным или непрочным соединением образуюущих ее частей."

В книге даются определения понятиям: выпаривание, плавление и т.д.. "Выпаривание – это приведение в восходящее движение посредством нагревания частиц влаги, выходящих из влажного предмета в рассеянном состоянии. "
Бахманйар в главе "Об облаках, радуге, ветрах, землетрясениях, метеорах, кометах, месторождениях вод и минералов, о цвете неба и тому подобном" дает разъяснения всем названным явлениям природы.

Человек с глубоких времен, со времен появления (рождения) на Земле, хочет понять все окружающее и, конечно же, самого себя. Тогда на арену выходит проблема разума и умопостигаемости всего того, что происходит в нас и вокруг (в природе и во Вселенной вообще). В главе "О разуме и умопостигаемом" Бахманйар уделяет этой проблеме особое внимание. Он пишет: "Сильный умопостигаемый предмет – это тот, у которого сильное бытие. А, как ты уже знаешь, умопостигаемость предмета и бытие его как умопостигаемого суть одно и то же. Если бы бытие его было бытием для себя, то умопостигалось бы оно им же самим. Самым сильным бытием обладает то сущее, у которого нет потребности в сути бытия, а самым слабым – то, реальная сущность которого заключается в

патенциальности, и именно такова первоматерия. То сущее, у которого самое сильное бытие, является самым сильным в отношении умопостигаемости.”

Бахманйар считает, что: “Полное наслаждение достигается лишь благодаря обретению в этой жизни знания об истинной сущности существующих вещей. А сила разума, предрасположена по природе к принятию умопостигаемых форм у отрешенного от материи начала. ...подлинное наслаждение – это наслаждение умственное. ...Умственное наслаждение ....сильнее чувственного.”

Мудрый Бахманйар ал – Азербайджани утверждает: “Знай: бытие – счастье”. [14]

1. С.Г.Багирова, Сочинение “Татимма Сиван Ал–Хикма” Ал–Байхаки как образец средневекового энциклопедического справочника, Ташкент, “ФАН”, (1987) 139.
2. М.Б.Баратов, Великий мыслитель Абу Али Ибн Сина, Ташкент, (1980) 200.
3. В.В.Бартольд, Ученые мусульманского Ренессанса, Москва **VI** (1966) 303.
4. Ф.Бекон, Сочинения, Москва, **I** (1971) 300, **II** (1971) 360.
5. Вклад мусульман в мировую цвилизацию, Баку, “Идрак” (2008) 179.
6. Избранные произведения мыслителей стран Ближнего и Среднего Востока. Москва, (1961) 367.
7. Z.C. Məmmədov, “Bəhmənyarın fəlsəfəsi”, Bakı, Elm, (1983) 208.
8. Научное наследство. Из истории физико–математических наук на средневековом Востоке, Москва, **VI** (1983) 335.
9. Е. Б. Рашковский, Науковедение и Восток, Москва, (1966) 250.
10. Ф.Роузенталь, Торжество знания. Концепция знания в средневековом исламе, Москва, (1978) 290.
11. А.В.Сагадеев, Ибн Сина (Авиценна), Москва, (1980) 239.
12. Şərq fəlsəfəsi (IX – XII), Bakı, (1999) 303.
13. Я.Г.Дорфман, Всемирная история физики с древних времен до конца XVIII в., Москва, Наука, (1974) 351.
14. Бахманйар ал-Азербайджани. Ат-Тахсил. **I-III**. (1983-1986) 196, 260, 297.
15. Г.Б.Абдуллаев, Л.М.Велиев, “Дедукция Бахманйара”,“Elm və həyat” **2** (2010).

FİZİKA ELMİNİN BAŞLANĞICINDA

N.B.SOLTANOVA

Bu məqalədə elm tarixinin orta əsrlər dövrü – Şərq Renessans zamanına diqqət yetirilir. Avropa Şərqin məktəbinə, elmi nəticələrinə istinad etmədən onlardan istifadə edərək, Qərbin Renessansını yaratdı. Bu isə elm tarixində Yeni dövrün başlanması ilə orta əsrlərin dumanlı, qaranlıq bir məkan kimi qalmasına səbəb oldu. Bəhmənyar Əl – Azərbaycani Şərqin orta əsr dövrünün korifeylər cərgəsində olan müdrik alimdir. Bəhmənyarın “Ət – Təhsil” əsərini tədqiq edərək, fizika elmi sahəsində Qərbi yüzillərlə geridə qoyan bir neçə problem aşkar olunur.

AT THE BEGİNNİNGS OF PHYSİCAL SCİENCE

N.B.SOLTANOVA

This paper has been considered the medieval period in the history of sience – a Renaissance of the east, which enjoyed the fruits of the West without options, the Rensissance building of the West, but for some reason – that create the mist and dark bands to the medival period. Bahmanyar al - Azerbaijan – was a wise scholar from a number of luminaries of medieval East. Analyzing labor Bahmanyara “At-Tahsili” we have seen a number of unresolved issues and problems of physics, which beat the West for centuries.

Редактор: Ш.Нагиев, Ф.Мамедов

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

ОБ АБСОРБЦИОННОМ СПЕКТРЕ Т ТЕЛЬЦА

Н.Х.ГУЛИЕВ*, О.В.ХАЛИЛОВ*, Н.З.ИСМАИЛОВ*,**

*Шамахинская Астрофизическая Обсерватория НАН Азербайджана**
AZ 372243, г.Шемаха
*Бакинский Государственный Университет***
AZ1148, г.Баку, ул. З.Халилова, 23

В работе приводится анализ результатов спектральных наблюдений звезды T Tau, выполненные за 1971-1988гг. в ШАО НАН Азербайджана. Обнаружена переменность абсорбционного спектра с характерным временем от 1 до нескольких часов. С усилением эмиссионного спектра наблюдается значительное изменение эквивалентных ширин абсорбционного спектра звезды. Определен интервал изменений спектрального класса от G3 до K0, а класс светимости соответствует V ($Mv=4.6^m$).

ВВЕДЕНИЕ

Звезды типа Т Тельца (TTS), как правило, наблюдаются в районах скопления газопылевого вещества и часто с ними связаны небольшие светящиеся туманности или джеты [1,2]. Наблюдение ярких эмиссионных линий и УФ избытков в спектрах TTS указывает на существование у них плотных и горячих внешних слоев, сходных с солнечной хромосферой и короной [1,3]. Однако природа этих структур до сих пор не разгадана.

Звезда T Tau (HD 284419, BD +19706) известна как переменная с 1852 года [4]. Ранние спектральные наблюдения показывали о наблюдении в спектре звезды эмиссионных линий H и K CaII, линии бальмеровской серии водорода, прослеживающий до H_ε, а иногда и до H_{14} [5,6]. В работе [7] отмечены эмиссии в линиях D NaI, которые в [6] также были обнаружены и как линии поглощения. Кроме того, в спектре звезды наблюдены эмиссионные линии SiI, FeI, FeII, TiII, CrII, [FeII] λ=4244Å, [SII] λ=4068Å и многочисленные абсорбционные линии позднего спектрального типа. В красной части спектра также наблюдаются запрещенные линии [SII] λλ 6716, 6731 ÅÅ, [NII] λλ 6548, 6583ÅÅ, [OI] λλ 6300, 6364ÅÅ, [OII] λλ 3726, 3729ÅÅ [19]. По линиям поглощения спектральный класс T Tau оценивается в пределах G2V-K1V [8, 9, 5].

После исследований Джоя [5,10] и Хербига [11] звезда считается прототипом группы молодых звезд малой массы. По данным Бебкока [12] спектральный класс соответствует dGe, Хербига [9] и Бонсака и Гринстейна [13] - dG5e, Дибая [14] – dK0e, Кухи [15] - K1eV. Существует множество работ, в которых спектральный класс T Tau определен разными методами, и чаще всего как dG5 или как dK1.

Наблюдалось синхронное уменьшение интенсивностей эмиссионных линий водорода H_β, H_γ, и H, K CaII, примерно в 3 раза, в течение 3-х часов [16]. Согласно [12] интенсивность магнитного поля меньше, чем 1000 Гс, т.к. нет линий полушириной больше 0.3Å.

В работах Исмаилова и Рустамова [17,18] исследован эмиссионный и абсорбционный спектр T Tau. Показано, что эмиссионный спектр по линиям водорода H_β-H_δ и H, K CaII показывает вспышечный характер, меняется от сезона к сезону. Спектральный класс звезды меняется в интервале G5-K0

Лучевые скорости по абсорбционному спектру T Tau по данным разных авторов различаются на величину не более 10км/с. Например, по данным Джоя [5] лучевая скорость звезды соответствует +24.6км/с, по Кухи [6] в 1960 г. +17км/с, в 1962 г. +20км/с, по Абта и Бигса [20] +18.5км/с, по Хербигу [9] +22км/с.

Известно, что у T Tau было обнаружено три компонентов - T TauN + (T TauSa + T TauSb) на небольшом угловом расстоянии (0."68 и 0."12 соответственно)

[21, 22]. Так как остальные компоненты весьма слабы видимом диапазоне спектра, их вклад в излучение является ничтожно малой. Поэтому, в дальнейшем, все наши выводы будут относится только компоненте T TauN.

Надо сказать, что, как и в случае других TTS, в случае T Tau наблюдательные данные, за исключением одиночных работ, носят отрывочный характер. Так как подобные объекты являются весьма непредсказуемыми и сложными, для получения основательных результатов наблюдений по TTS необходим комплексный подход к наблюдениям. Очень важно здесь выполнение однородных наблюдений за длительный период времени. К настоящему времени в ШАО накоплен обширный однородный спектральный материал по звезде T Tau. В настоящей работе исследован абсорбционный спектр T Tau на основании наблюдательного материала полученного за период 1971-1988 гг.

НАБЛЮДЕНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ

Наблюдения были выполнены на кассегреновском фокусе 2м телескопа ШАО НАН Азербайджана с применением 2x2 призменного спектрографа «Канберра». Для фотографирования спектров использовались 35 мм фотопленка А-500, а также фотопластинки типа Kodak (103a0 и 103aF) и ORWO (ZU-21). Калибровка пластинок производилась на спектрографе ИСП-51, с помощью 9-ступенчатового ослабителя. Калиброванные снимки проявлялись в том же проявителе, что и спектрограммы звезды – в проявителе MWP-2 в течение 10-11 минут при 20°C. Спектры были записаны на микрофотометре «Лирефо» с увеличением 40 раз. Были измерены эквивалентные ширины наиболее значимых абсорбционных линий Fe I λλ4383, 4325, 4271ÅÅ, Ti I, Ca I λ4291Å, Ca I λ4226Å.

Для системы эквивалентных ширин (W_λ) 2x2 призменного спектрографа разработаны критерии проведения двумерной количественной спектральной классификации в спектральном диапазоне B9-K0 [23]. При каждом определении спектрального класса можно применить до 5-6 критериев классификации. Средняя ошибка определения спектрального класса по этой системе составляет 0.6 - 0.7 подкласса. На основании измеренных значений эквивалентных ширин абсорбционных линий определѐн спектральный класс для отдельных ночей. В Таблице 1 приведены эквивалентные ширины и спектральные классы по отдельным линиям, а также средние значения эквивалентных ширин и спектральных классов по всем линиям поглощения для избранных ночей. В последнем столбце Таблицы 1 приводится общее количество спектрограмм, использованных при усреднении за данную ночь.

Измерения показали, что эквивалентные ширины линий поглощения меняются со временем. Из табл.1 видно, что с возрастанием эквивалентных ширин спектральный класс звезды меняется от K1 до F6, а средний спектральный класс по разным критериям меняется от G3 до K0. Известно, что абсорбционные линии в спектре T Tau в видимой области вуалированы непрерывной эмиссией неизвестной природы. Возможно, такая переменность абсорбционного спектра и спектрального класса звезды возникает в результате изменения этой непрерывной эмиссии.

Результаты анализа показали, что спектральный класс T Tau должен быть позднее K0, но из-за влияния линейчатой эмиссии и поглощения оптического излучения пылевыми оболочками спектральный класс, определяемый по линиям поглощения кажется более ранним, чем в действительности.

На рис.1 приведена временная зависимость значений эквивалентных ширин двух разных сезонов наблюдений. Как видно из Рис.1, наблюдается изменение эквивалентных ширин линий в течение отдельных ночей с характерным временем от 1 до нескольких часов. Значительные колебания значений эквивалентных ширин

наблюдаются (в JD 2442774) в тот момент, когда высокий уровень излучения эмиссионного спектра (рис.1).

Таблица 1.

Значения эквивалентных ширин абсорбционных линий и спектральный класс T Tau.

JD 2400000+	FeI 4383		FeI 4325		TiI, CaI 4291		FeI 4271		CaI 4226	средний	кол-во спектров
	W_λ	Sp	W_λ	Sp	W_λ	Sp	W_λ	Sp	W_λ	Sp	
989.203	3.6	G9	2	G7	2.2	G3	2.6	G8	2.8	G7	8
2774.297	2.4	G3	1.2	F6	1.6	F9	2.1	G5	2.4	G5	12
3496.234	3.5	G9	1.8	G5	-	-	2.6	G8	3.4	G7	3
3504.252	3.4	G9	1.9	G6	-	-	3	K0	3	G8	6
3510.259	3.9	K1	1.8	G5	-	-	3.3	K1	3	G9	6
3511.207	3.7	K0	2.2	K0	3.8	K0	2.9	K1	2.9	K0	5
3512.391	3.6	G9	2.2	K0	-	-	3.1	K0	3.4	K0	2
5691.458	2.4	G3	1.43	F9	1.9	G1	1.9	K3	2.5	G4	3
5693.423	2.7	G5	1.9	G6	2.2	G2	2.1	G7	2.4	G5	3
5695.445	2.5	G4	1.4	F9	2.1	G2	2.1	G7	2.5	G3	4
6108.310	2.8	G5	1.8	G5	2.3	G3	2.9	K1	3.1	G6	3

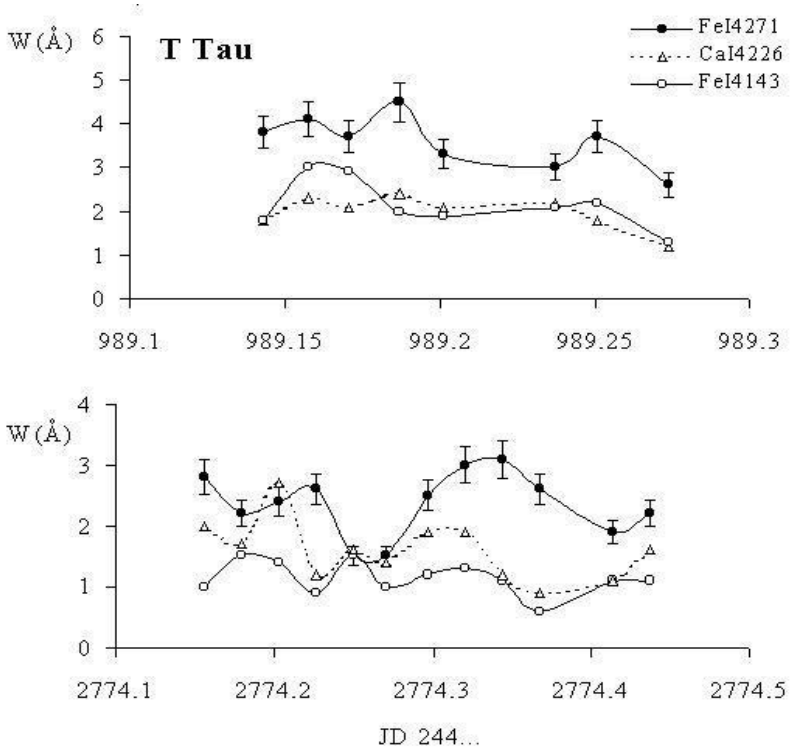


Рис.1.

Изменение эквивалентных ширин линий FeI λλ 4271, 4143ÅÅ (темные и светлые кружки) и CaI λ 4226 Å (треугольники) в двух разных ночей наблюдений 1971 и 1976гг. Вертикальные черточки, как пример, указывают величину ошибки измерений эквивалентных ширин указанных линий.

Для определения характера изменения абсорбционного спектра мы использовали значения эквивалентных ширин эмиссионных линий водорода серии Бальмера Hβ-Hδ, H и K CaII и [SII] λ4068Å, взятый из [24].

Пусть, эквивалентная ширина линии у звезды стандарта есть W_0, а эквивалентная ширина той же линии у звезды T Tau в *i*-й момент наблюдений равна W_i. Тогда мы можем ввести коэффициент, выражающий меру эмиссии, который оценивает степень «замывания» абсорбционных линий – вклад

дополнительного излучения в абсорбционных линиях. Коэффициент *к* будет выражать изменение эквивалентной ширины спектральной линии переменной относительно стандарта:

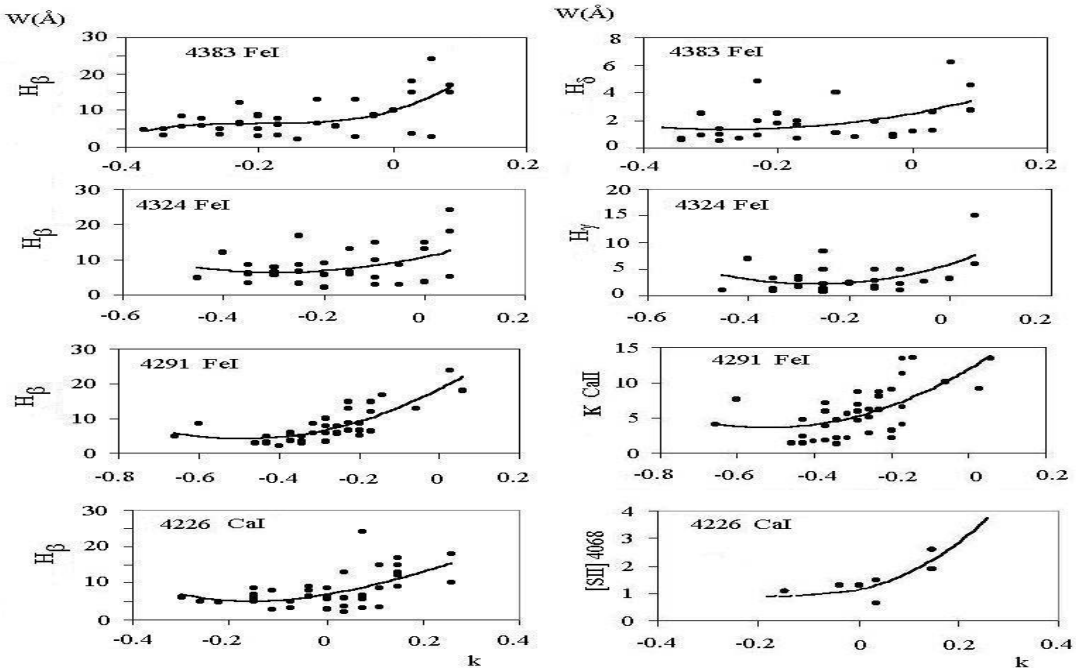
$$k_i = \frac{Wi - Wo}{Wo} \quad .$$

Отрицательные значения коэффициента означают, что из-за накладывающейся эмиссии фотосферные линии имеют меньше эквивалентных ширин, чем соответствующие линии звезды стандарта. С переходом к положительным значениям коэффициента, накладывающаяся на абсорбционный спектр эмиссия уменьшается, а линии в абсорбции становятся «чище».

На Рис.2 приведена зависимость коэффициента *к* от эквивалентных ширин наиболее сильных эмиссионных линий водорода Hβ-Hδ, H и K CaII и [SII] λ4068Å. Это позволяет нам исследовать возможную взаимосвязь между эмиссионным спектром и величиной накладывающейся эмиссии на абсорбционный спектр звезды. Из графика становится ясным, что практически во всех случаях, существует следующая тенденция: при больших значениях эквивалентных ширин эмиссионных линий водорода и H и K CaII наблюдается также увеличение абсорбционного спектра по линиям металлов. Но при средних и малых значениях излучения эмиссионного спектра, практически, отсутствует взаимосвязь между этими параметрами и мерой эмиссии в абсорбционных линиях.

В спокойном состоянии излучения эмиссионного спектра эквивалентные ширины абсорбционных линий металлов не показали быстрого изменения в течение ночи наблюдений. В таком состоянии наблюдается изменение абсорбционных линий лишь в разные ночи или сезоны. Но при активном состоянии эмиссионного спектра наблюдается быстрое изменение абсорбционного спектра звезды с характерным временем от 1 до несколько часов.

Рис.2.



Зависимость эквивалентных ширин эмиссионных линий отдельных линий водорода и H и K CaII от коэффициента меры эмиссии *k* в абсорбционных линиях металлов в спектре T Tau.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Спектральные исследования звезды T Tau показывают, что эмиссионный спектр звезды меняется с характерным временем от нескольких часов до нескольких дней. Существует предположение о том, что фотосферный спектр звезды не меняется, а переменность эквивалентных ширин абсорбционных линий меняется вследствие накладывающегося на него дополнительного эмиссионного излучения. Однако природа этого излучения остается неизвестным [25].

Наши результаты показали, что при усилении эмиссионного линейчатого спектра звезды наблюдается неожиданный результат: увеличиваются эквивалентные ширины абсорбционных линий. Этот результат не согласуется с вышесказанным предположением. Для интерпретации данного факта наблюдений можно обсудить три предположения: 1) модель холодного пятна, 2) возрастание самопоглощения в околозвездной оболочке вследствие увеличения непрозрачности в оболочке звезды, 3) звезда является двойной или кратной системой. Так как этот вопрос является очень важным для выяснения физической природы звезд типа T Тельца и родственных объектов, не вдаваясь в подробности обсуждения, заметим, что этот вопрос требует дальнейшего исследования.

Таким образом, можно сделать следующие выводы.

- Обнаружена переменность абсорбционного спектра с характерным временем от 1 до нескольких часов. В течение 17 летних наблюдений изменение спектрального класса соответствует интервалу G3-K0V.
- С усилением эмиссионного спектра наблюдается значительное изменение эквивалентных ширин абсорбционного спектра звезды. При активном состоянии эмиссионного спектра наблюдается увеличение эквивалентных ширин абсорбционных линий металлов.

1. R.Mundt, T.R.Ray, T.Buhrke, A.C.Raga, J.Solf, *Astron. Astrophys.,* **232** (1990) 37.
2. R.Mundt, F.M. Walter, E.D. Feigelson, U. Finkenzeller, G.H. Herbig, *Astrophys*, **269** (1983) 229.
3. R.Mundt, *Astrophys,* **280** (1984) 749.
4. F.G.Pease, Astrophys, **45** (1971) 89.
5. A.H.Joy, *Astrophys,* **110** (1949) 424.
6. L.V.Kuhi. *Astrophys,* **140** (1964)1409.
7. S.F. Sanford, *PASP*, **99** (1947) 134.
8. Г.В.Зайцева, *Астрономический Циркуляр*, № 984 (1978).
9. G.H.Herbig, *Astrophys,* 214, (1977), 747.
10. A.H.Joy, Astrophys, 102, (1945), 168.
11. G.H.Herbig. Adv. Astron. and Astrophys., 1, (1962), 47.
12. H.W.Babcock. Astrophys, 3, (1958), 141.
13. W.K.Bonsack., J.L. Greenstein. Astrophys. 131, (1960), 83.
14. Э.А.Дибай, Астрофизика, 5, (1969), 249.
15. L.V.Kuhi. Astron. and Astrophys. Suppl. Ser., 15, (1974), 47.
16. З.А.Исмаилов., Л.В.Тимошенко, *Циркуляр ШАО,* № 67, (1979), 14.
17. З.А.Исмаилов, Б.Н.Рустамов, *Циркуляр ШАО,* № 97, (1999), 10.
18. З.А.Исмаилов, Б.Н.Рустамов, *Циркуляр ШАО*, № 97, (1999), 14.
19. G.H.Herbig, *Astrophys*, 111, (1950), 11.
20. H.A. Abt , E.S. Biggs, *Bibliography of stellar Radial velocities, New York,* (1972) 502.
21. G.Duchene, A.M.Ghez, C.McCabe, *Ap. J.,* **568** (2002) 771.
22. R.Koehler, T.Ratzka, T.M.Herbst, M.Kasper, *Astron.Astrophys*., **482** (2008) 929.

23. Б.Н.Рустамов, *Кинем. физ. небес. тел.*, **3** № 2 (1987) 15.
24. N.Z.Ismailov, N.Kh.Guliyev, A.A.Aliyeva, *Perem. zvezdi,* № 5 (2006) 26.
25. П.П.Петров, *Астрофизика*, **46** (2003) 611.

T BUĞA ULDUZUNUN UDULMA SPEKTRI HAQQINDA

N.X.QULIYEV, O.V.XƏLILOV, N.Z.İSMAYILOV

İşdə 1971-1988-ci illər ərzində AMEA ŞAR-da aparılmış T Tau ulduzunun spektral müşahidələrinin nəticələri verilmişdir. Udulma spektrinin 1 saatdan bir neçə saatadək xarakterik vaxtla dəyişməsi aşkar olunmuşdur. Şüalanma spektri gücləndikcə, udulma xətlərinin ekvivalent enlərində artma muşahidə olunur. Spektral sinfin dəyişmə intervalı G3-K0, işıqliq sinfi isə V ($Mv=4.6^m$) kimi təyin olunmuşdur.

ON THE ABSORPTION SPECTRUM OF T TAURI

N.Kh.QULIYEV, O.V.XALILOV, N.Z.İSMAILOV

The rezults of spectral observations of the star T Tau for 1971-1988 in ShAO NAS of Azerbaijan have been presented. Absorption spectrum variability with characteric time from 1 to some hours have been obtained. We have got the increase of equivalent whidthes of absorption lines with the increasing intensities of emission lines. During observing time spectral classes of the star have been shown variability for G3-K0, a class of luminosity - V ($Mv = 4.6^m$).

Редактор: Э.Гулиев

AZƏRBAYCAN MİLLİ ELMLƏR AKADEMİYASININ XƏBƏRLƏRİ
Fizika-riyaziyyat və texnika elmləri seriyası, fizika və astronomiya 2010 №5

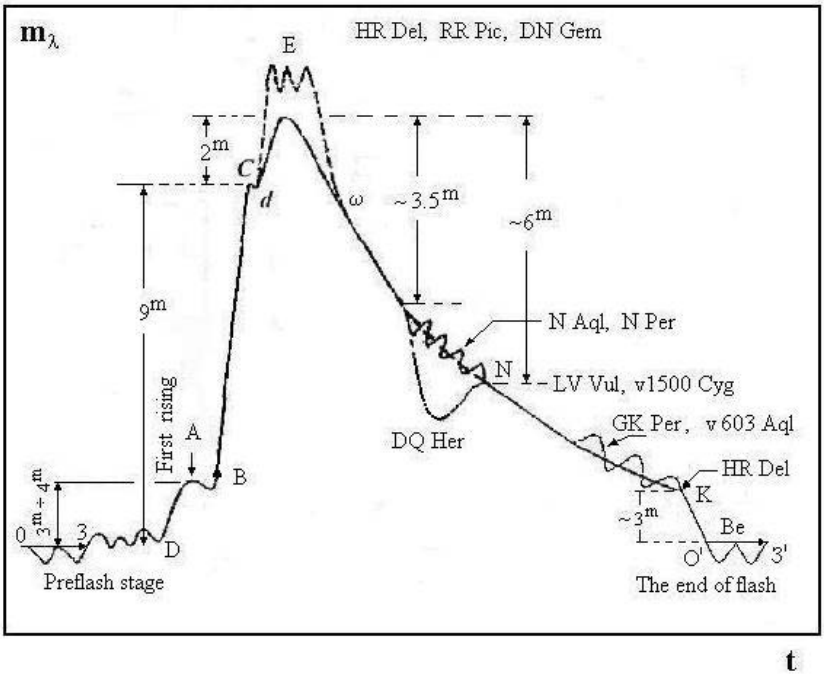
TİPİK YENİ HR DELFİN 1967 ULDUZU PARLAQLIĞININ MAKSİMUM FAZASININ TƏDQİQİ

M.B.BABAYEV, Ə.M.XƏLİLOV

AMEA N. Tusi adına Şamaxı Astrofizika Rəsədxanası
AZ 372243, Şamaxı ş.

Tipik Yeni HR Delfin 1967 ulduzu parlaqlığının maksimum fazasının zamandan asılı olaraq uzunmüddətli tədqiqi göstərir ki, RR Pic (2 pik) və GN Gem (2 pik) ulduzlarında olduğu kimi bu ulduzda da əlavə maksimum piklər (3 pik) müşahidə olunur. Əlavə alışma piklərinin əmələ gəlməsinə səbəb ulduzun yeni kimi alışmasından sonra onun səthində yayılan MHD dalğalarıdır.

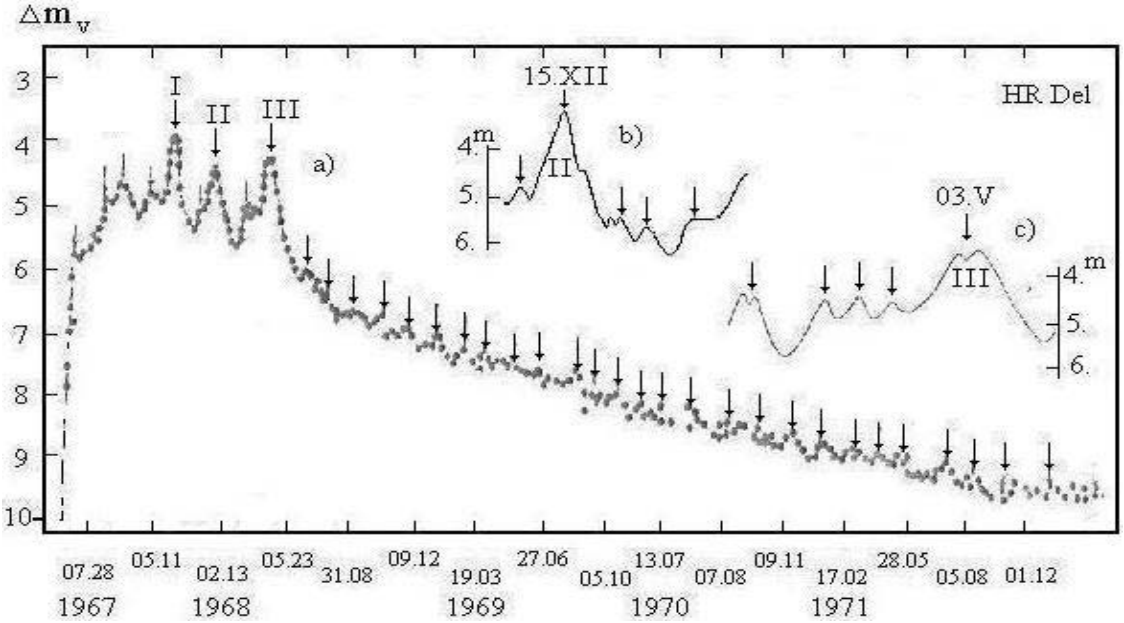
AMEA N.Tusi adına Şamaxı Astrofizika Rəsədxanasının 2-m, prizmalı 350 mm-lik AST-452 və 700 mm-lik teleskoplarında 1967-2002-ci illərdə tipik Yeni HR Delfin 1967 ulduzunun müntəzəm olaraq fotometrik, fotoelektrik və spektral müşahidələri aparılmışdır. Yeni ulduzlar əsasən fotometrik (fotoqrafik, fotoelektrik) və spektrofotometrik müşahidələr əsasında tədqiq olunur. Bir-birini tamamlayan bu metodlarla bəzi dəyişən ulduzların yeni ulduz olması müəyyənləşdirilir. Fotometrik metodla yenilər üçün xarakterik olan parlaqlığın zamandan asılı dəyişmə əyriləri qurulur. Parlaqlığın dəyişməsinə görə yeni ulduzların xarakterik xüsusiyyətləri tədqiq olunur. Yeni ulduzların əsas xüsusiyyətləri bunlardır: ulduzun alışmadan əvvəlki əsas vəziyyəti, ulduzun qoşalılığı, parlaqlığın kvaziperiodik dəyişməsi, yenileşməyə hazırlıq dövrü və tipik yenilərdə ilk dəfə müşahidə olunan parlaqlığın kiçik amplitudlarla ($\sim 3^m \div 4^m$) ilkin yüksəliş anı. Sonrakı mərhələdə isə parlaqlığın böyük sürətlə yüksəlməsi və ulduzun yenileşmə fazasına daxil olması mərhələsi başlayır. Nəhayət ulduz yeni kimi alışma verərək parlaqlığının maksimum həddinə çatır. Yeni ulduzlarda parlaqlığın artması dayandıqdan sonra, parlaqlıq bir qədər asta sürətlə düşməyə başlayır və ardıcıl olaraq nebulyar fazaya, minimuma keçir və nəhayət ulduz «post-yeni» fazasına keçərək parlaqlıq əyrisini tamamlayır (Şək.1) [1]. «Post-yeni» fazasında artıq yeni ulduzların fəallığı zəifləyir.



Şək.1.
Tipik Yeni ulduzlarda parlaqlığın sxematik dəyişmə əyrisi [1].

Məqalədə məqsəd Tipik yeni HR Del ulduzunun maksimum fəallığı dövründə parlaqlıq əyrisinin zamandan asılı olaraq dəyişməsinin və parlaqlığın bu fazasında müşahidə olunan alışmaların baş vermə səbəblərinin keyfiyyətcə təhlilini aparmaqdır.

Tipik HR Delfin 1967 ulduzunun altı aya yaxın davam edən maksimum fəallığı dövründə parlaqlıq əyrisinin təhlili göstərdi ki, parlaqlığın maksimum fazasında əsas pikdən başqa əlavə üç yeni alışma piki də müşahidə olunur (şək.2). Əlavə piklər parlaqlığını zəif dəyişən RR Pic və GN Gem ulduzlarında da müşahidə edilmişdir (şək.3) [2]. Ona görə də tipik yeni ulduzlarda, parlaqlığın dəyişmə əyrisində əlavə alışma pikləri nəzərə alınmışdır [1] (şək.1). Bu məqalədə əlavə piklərin baş vermə səbəblərinin keyfiyyətcə təhlili aparılmışdır.



Şək.2.

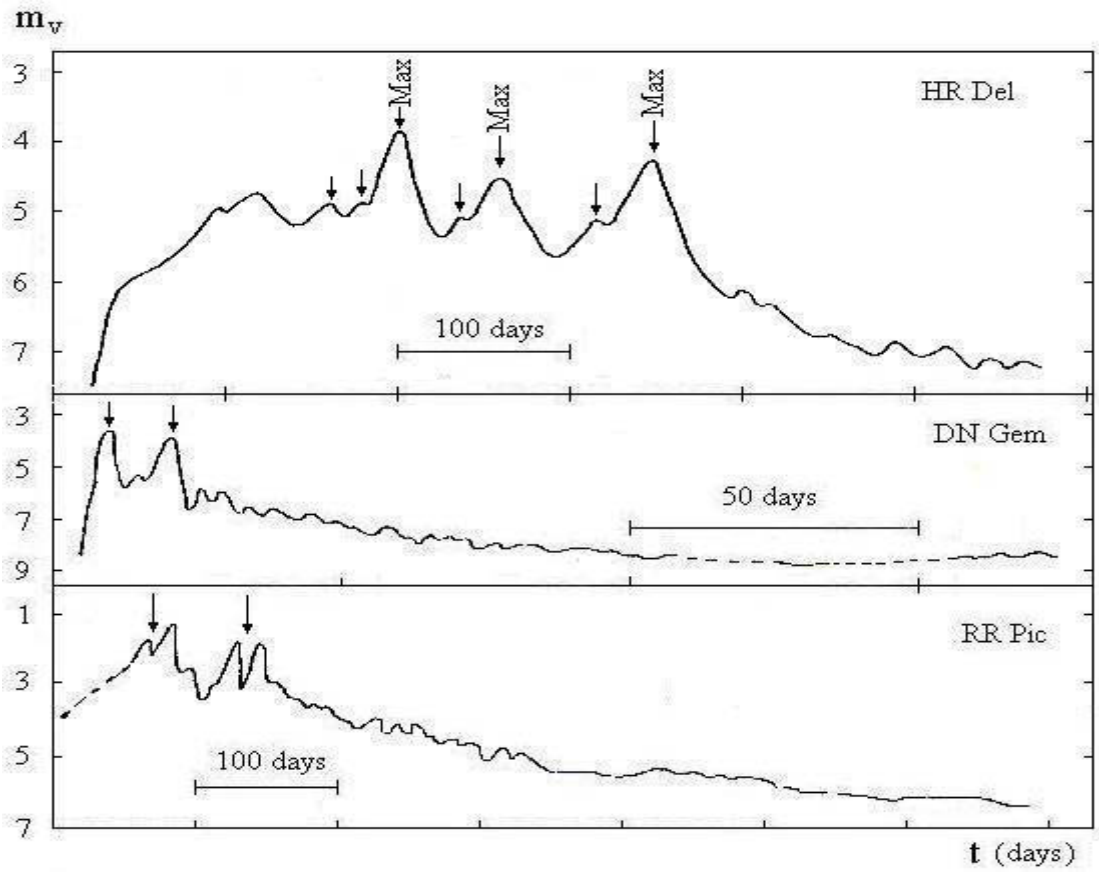
Tipik yeni HR Del 1967 ulduzunun 1967-1972-ci illərdə parlaqlığının dəyişmə əyrisi [3]. şəkildə b) və c) əlavə alışma pikləridir.

Isles [3] 1967-1972-ci illərdə müxtəlif müşahidəçilər tərəfindən müşahidə olunan HR Del Tipik yeni ulduzu üçün parlaqlığın dəyişmə əyrisini qurmuşdur (şək.2).
Yenilərin sxematik parlaqlıq əyrisi HR Del ulduzu parlaqlığının maksimum fazasını tamamilə əhatə edir. şək.2 –dən görünür ki, HR Del tipik yeni ulduzu parlaqlığının maksimum fazasında əlavə piklər vardır. Belə piklərin olması əvvəlki işlərimizdə də [2, 4] qeyd olunmuşdur(şək.4).

şAR-ın 350 mm teleskopunda HR Del ulduzu kəsilməz spektrinin λ=4230Å dalğa uzunluğu oblastında müşahidələr aparılmışdır. Müşahidə materiallarına əsasən ulduzun monoxramatik (m_λ) dalğa uzunluğunda ulduz ölçüsü hesablanaraq zamandan asılı parlaqlıq əyrisi qurulmuşdur

şəkil 4-dən göründüyü kimi, parlaqlıq əyrisində üç yox, iki maksimum alışma piki müşahidə olunur. Ulduzun fəallığı nəticəsində ikinci pik yaranan zaman şamaxı Astrofizika Rəsədxanasında ulduzun səmadakı vəziyyəti, yəni kulminasiya vaxtı gündüzlər olduğu üçün bizim tərəfimizdən müşahidə olunmamışdır. Ona görə də biz əlavə piklərdən yalnız I və III-ü müşahidə etmişik. Alınmışbu nəticələr Balmer sıçrayışı ($|D|\rightarrow t$) [5] və mütləq spektrofotometrik qradientin ($\varphi_{\lambda=4000}\rightarrow t$) tədqiqi zamanı da təsdiq olunub [6]. Müşahidə olunan maksimum piklərin əmələ gəlməsinə səbəb yenişən ulduzun alışmadan sonrakı ilk dövrlərdə səthinin bir müddət açıq qalması və həmin

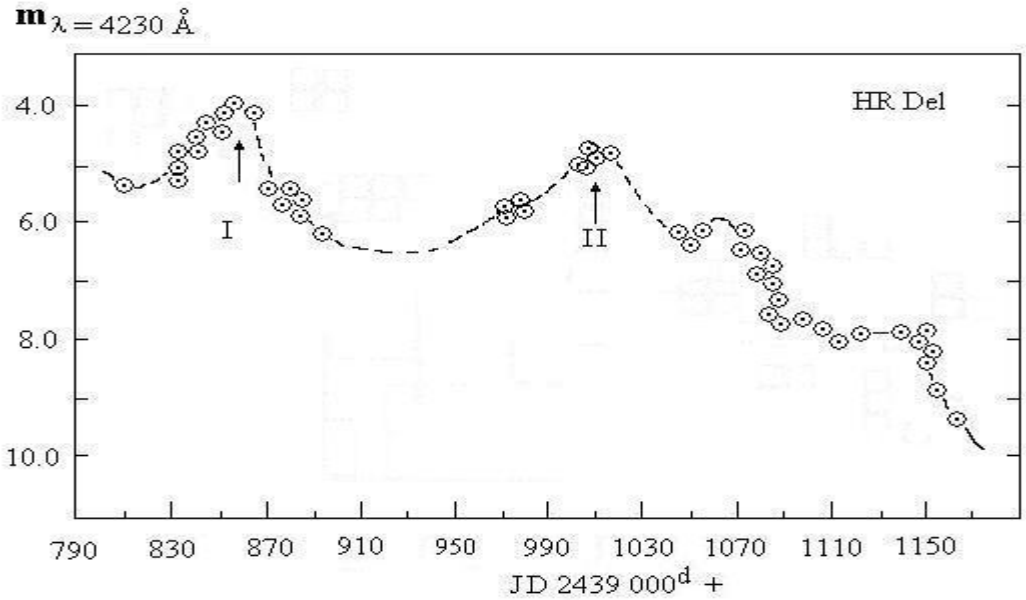
anlarda daxilində formalaşmış MHD dalğalarının ulduz səthini genişləndirərək böyük miqyasda onun səthinə saliton şəklində çıxmasıdır. Yəni əlavə piklərin yaranmasına səbəb ulduz səthinin böyük bir hissəsini əhatə edən ulduz alışmasıdır. Bu tip alışmalar cırtdan yenilərdə və yeniyə bənzər ulduzlarda da müşahidə olunur (UV Kit) [7] (Şək.5).



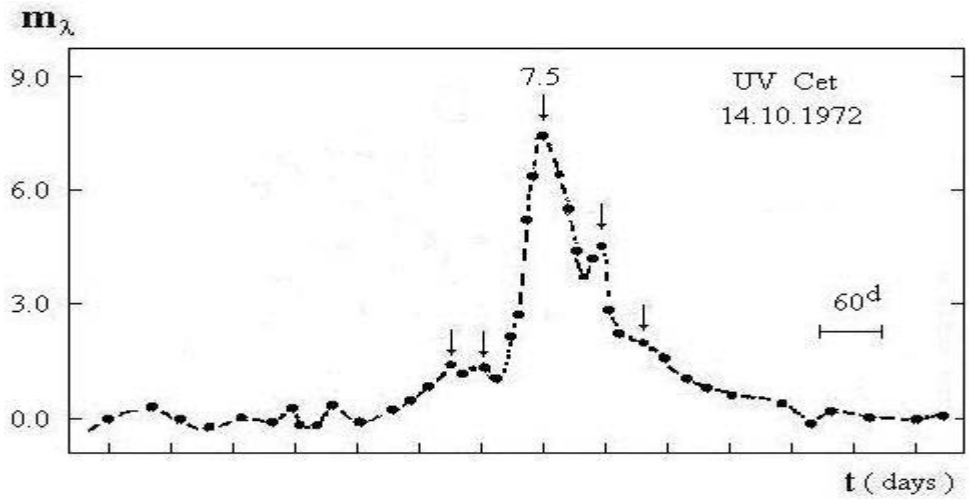
Şək.3.

Tipik yeni HR Del, RR Pic və DN Gem ulduzlarının parlaqlıqlarının maksimum fazasında dəyişmə əyriləri.

Maraqlıdır ki, müşahidə olunan ulduz alışmaları (Şək.1, 2, 5) tamamilə bir-birinə oxşayır. Qeyd etdiyimiz kimi bu tip alışmalar parlaqlığın ilkin yüksəlişindən sonra baş verir (Şək.2, 3, 5). Bu alışmaların hər birində parlaqlığın qısamüddətli ilkin yüksəlişini, alışmanın maksimumunu, zəifləməsini və nəhayət son fazasını, yəni dəyişmənin bütün xüsusiyyətlərini parlaqlıq əyrisində əyani sürətdə görmək olar [8]. Bu cür alışmalar ulduz səthinin böyük bir sahəsini əhatə edir və onun səthinin şişərək genişlənməsi nəticəsində yaranmasını sübut edən faktlardan biridir. Belə ulduz alışmaları əslində iki mərhələdə baş verir. Lakin, Günəşdə belə alışmalar bir mərhələdə müşahidə olunur. Çünki Günəş alışmaları onun səthinin kiçik bir sahəsini əhatə edir. Beləliklə, bir daha aydın olur ki, qısa müddətli alışmalar Moqilevskinin [9] qeyd etdiyi kimi, ulduz səthində müşahidə olunan MHD dalğalarının güclənməsi nəticəsində baş verir. Tipik yeni ulduzlarda parlaqlığın maksimum fazasında müşahidə olunan alışmalar ulduzun daxili qatlarında baş verən fiziki proseslərin nəticəsidir.



Şək.4.
Tipik yeni HR Delfin 1967 ulduzunun λ = 4250 Å dalğa uzunluğunda ulduz ölçüsünün dəyişmə əyrisi.



Şək.5.
UV Cet cırtdan ulduzunun alışma dövründə parlaqlıq əyrisi [8].

1. M.B.Babayev, A.M.Babayeva, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXII** № 5 (2002) 118.
2. M.B.Babayev, *Fizika,* **7** №2 (2001) 35.
3. J.E.Isles, *Brit. Astr. ASSOC,* № 85 (1974) 54.
4. M.B.Babayev, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences*, *Series of Physical-mathematical and Technical sciences*, *Physics and Astronomy,* **XXI** №2 (2001) 107.
5. M.B.Babayev, *Astron.Sirkulyar (AS),* №585 (1971) 4.
6. M.B.Babayev, *Astron.Sirkulyar (AS),* № 610 (1971) 2.
7. N.N.Kiselev, N.V.Narizhnaya, *Astronomicheskii Zhurnal (AZh).,* **54** (1977) 606.
8. Р.Е.Гершберг, *Космонавтика и Астрономия, Изд.Знания, Москва*, (1990) 64.

9. Е.И.Могилевски, *Физика солнечной активности, Изд.Мир, Москва,* (1979) 305.

INVESTIGATION OF THE MAXIMAL PHASE BRIGHTNESS OF THE TYPICAL NOVA HR DELPHINUS 1967

M.B.BABAYEV, A.M.KHALILOV

The investigation of the typical nova HR Delphinus at the maximal brightness on time has shown that likely to stars RR Pic (2 peak) and DN Gem (2 peak) an additional maximum peak in the brightness curve of this star has been observed also. The generation mechanism of this flare peaks is the MHD waves observed after flare as nova at the surface of the star.

ИССЛЕДОВАНИЕ МАКСИМАЛЬНОЙ ФАЗЫ БЛЕСКА ТИПИЧНОЙ НОВОЙ ЗВЕЗДЫ HR ДЕЛЬФИНА 1967

М.Б.БАБАЕВ, А.М.ХАЛИЛОВ

Длительное исследование типичной новой звезды HR Дельфина 1967 в фазе максимума блеска в зависимости от времени показывает, что как в случае звезд RR Pic (2 пика) и DN Gem (2 пика), так же у этой звезды обнаружены пики максимумов (3 пика). Причиной возникновения этих дополнительных вспышечных пиков является МГД волны, распространяющиеся на поверхности звезды, после ее вспышки как новой звезды.

Редактор: Э.Гулиев

MÜNDƏRƏCAT

Aşağiölçülü elektron sisemləri üçün aşqar ionlarindan səpilmə halinda eninə maqnit müqaviməti
B.M.Əsgərov, H.İ.Hüseynov, S.R.Fiqarova.....3
Mürəkkəb maqnitnizamli kristallarda səth və həcm spin dalğalari
M.N.Abdullyev.....9
ZnS/GaAs və $CuGaS_2$/GaP –nazik təbəqə/altliq sistemlərində qəfəs təhrif olunma ilə yaranmiş elastooptik effektin ellipsometrik öyrənilməsi
X.N.Xəlilova, D.İ.Hüseynova, S.V.Həmidov, V.N.Cəfərova, Z.A.Cahangirli, H.S.Orucov, N.T.Məmmədov.....17
GeSe birləşməsinin zona quruluşunun aoxk metodu ilə hesablanmasi və Ge_{Se}, Se_{Ge} antistruktur defektlərinin dərin səviyyələrinin tədqiqi
Z.A.Jahangirli, G.S.Orucov.....25
Hidrofob səthlərin üzərində atom-qüvvə mikroskopiya metodlari ilə nazik adsorbat su təbəqələrinin tədqiqi
S.C.Ələkbərov.....31
γ- şüalarinin $TlInS_2$ <Cr> kristallinin elektrik xassələrinə təsiri
R.M.Sardarli, O.Ə.Səmədov, İ.İ.Aslanov, A.P.Abdullaev, F.T.Salmanov, M.M.Quluev.....37
Kəsilməz dual Han çoxhədliləri və relyativistik sinqulyar ossilyator məsələsinin dəqiq həlli
Ş.M.Nağiyev, E.İ.Cəfərov, R.M.İmanov.....41
Konservativ Bricmen üsulu ilə alinan InAs-GaAs bərk məhlul monokristallarinda komponentlərin konsentrasiyon profili
P.G.Əjdərov, M.Ə.Əkpərov, V.K.Kyazimova, Ə.İ.Ələkpərov.....45
Qamma şüalari ilə şüalanan dəmirlə legirə olunmuş indium fosfid kristalinda defektəmələgəlmə
M.İ.Əliyev, Ş.Ş.Rəşidova, M.A.Hüseynova, İ.M.Əliyev, N.N.Haciyeva.....49
Elektrogeneratorlar üçün bismut və sürmə halkogenidlərin əsasinda laylar arasinda nanostrukturlu termoelementlər
F.K.Ələskerov, S.B.Bağirov, S.Ş.Gəhramanov, Q.Kavei.....52
TlS–FeS, TlSe–FeSe sistemlərinin hal diaqrammasi və $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$ birləşmələrinin maqnit xassələri haqqinda
R.Q.Vəliyev, E.M.Kərimova, F.M.Seyidov, R.Z.Sadixov, N.Z.Həsənov.....56
$CaGa_2S_4$:Pr,Ce kristallarinin fotolüminessensiyasinin həyəcanlanma spektri və intensivliyinin temperatur asililiği
S.A.Abuşov.....62
Elektron və protonlarin səpilməsi ilə nüvə daxilində nuklonlarin ekzotik xüsusiyyətlərinin öyrənilməsi
M.M.Mirabutalibov.....66
$YbBi_2Te_4$ və $YbBi_4Se_7$ kristallarının optik spektrləri
N.Z.Cəlilov, M.A.Mahmudova.....71
Ag_2Se və Ag_2Te kristallarinin $\alpha \Leftrightarrow \beta$ keçidlərində histerezis hadisəsi
F.F.Əliyev, M.B.Cəfərov, A.A.Səddinova, N.A.Verdiyeva.....76
Monoxromatik şüalanmanin qisa impulslarinin enerjisinin və gücünün ölçülməsi metodu
Ə.Ə.Əliyev, N.C.İsmayilov, Ş.M.Quliyev, A.K.Məmmədov, R.İ.Muxtarova.....83
$Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ monokristallarinda polimorf çevrilmələr
A.F.Həziyeva, V.İ.Nəsirov, Y.Q.Əsədov, Y.İ.Aliyev.....87
PbTe<Tl> monokristallarinin In-Ag-Au ərintisi ilə ayrilma sərhəddinin elektrik xassələri
T.C.Əliyeva, N.M.Axundova, G.C.Abdinova, G.Ə.Əhmədova, C.Ş.Abdinov.....92
Qurğuşun artiqliğina malik PbTe monokristallarinin elektrik xassələrinə tablamanin təsiri
G.Z.Bağiyeva, N.B.Mustafayev, G.C.Abdinova, C.Ş.Abdinov.....96
Termoemal edilmiş $Ge_{1-x}Si_x$<Cu, Ga> kristallarinda mislə əlaqəli dərin akseptor kompleksler
L.A.Hüseyinli, Z.M.Zeynalov, Z.M.Zöhrabbəyova, H-G.X.Əjdərov.....100
Sinklə və indiumla aşqarlanmiş $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ bərk məhlullarinda elektrik və qalvanomaqnit xassələri
X.B.Əliquliyeva, N.A.Abdullayev, S.Ş.Qəhrəmanov, T.H.Kərimova, Q.S.Mehdiyev, K.M.Mustafayeva.....106

CREKA peptidinin analoqlarinin fəza quruluşu və konformasiya xassələri
G.C.Abbasova, İ.N.Əliyeva, Ə.İ.Ömərova, N.M.Qocayev.....112
Evropium ftor (EuF_3) aşqarlari əlavə edilmiş şüşəvari halkogenid yarimkeçirici Se-As sisteminin optik sabitləri
A.İ.İsayev, S.İ.Mendiyeva, S.N.Qəribova, R.İ.Ələkbərov, V.Z.Zeynalov.....121
Te ilə aşqarlanmiş n-$Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ bərk məhlullarinin monokristallarinda elektronlarin enerji spektri
B.A.Tahirov, O.I.Ibrahimova, S.Z.Dəmirova, T.F.Yusifova.....127
Etilenpropilen kauçuku əsasinda hazirlanmiş kompozitlərin fiziki-mexaniki və elektrofiziki xassələrinə Y-Ba-Cu-O YTI materialının təsiri
V.M.Əliyev.....133
ZPR-359 reaktoru üçün gecikən neytronlarin effektiv payinin və ani neytronlarin yaşama müddətinin hesablanmasi
.N.Mehdiyeva, L.Ə.Tayibov.....139
Qamma kvantlarla şüalandirilan qalayla legirə olunmuş InP kristallarinin optik xassələri
Ş.Ş.Rəşidova.....143
Neft və qazçixarma sənayesinin tullanti sularinin fenoldan təmizlənməsi
F.Ə.Teymurova, Ə.Y.Nəzərova, F.Ş.Jəfərova.....146
$TlInSe_2 - TlYbSe_2$ sistemində bərk məhlullarin əvəzlənməsi
M.M.Zərbəliyev, N.F.Qəhrəmanov, A.M.Əhmədova, Ə.B.Məhərrəmov.....149
Neytronlarin qeyri-elastiki səpilməsinin spin asililiq parametrinin təyini
X.Ş.Abdullayev, M.Ş.Məmədov, N.R.Məmmədov.....156
Qallium selenid monokristallarinin dielektrik əmsallarina və AC-keçiriciliyinə γ-şüalanmanin təsiri
S.N.Mustafaeva, M.M.Əsədov, Ə.Ə.İsmaylov.....159
$Cu_3In_5S_9$ monokristalinda alçaqtezlikli cərəyan ossilyasiyası
L.H.Həsənova, Ə.Z.Məhəmmədov, S.Ə.Cahangirova.....163
$FeGa_2S_4$–ün dəyişən elektrik sahəsində elektrikkeçiriciliyi
N.N.Niftiyev, O.B.Tağiyev, Z.F.Haciyeva, F.M.Məmmədov.....166
Fibroin lifin daxilinə fizetin molekullarinin diffuziyasinin birinci və ikinci mərhələsi
Y.H.Şükürlü.....169
Qeyri-müntəzəm divarli ifrat yüksək tezlikli düzbucaqli dalğaötürənin səthi impendasinin riyazi modeli
R.C.Rəsulov.....176
Xarici sahədə relyativistik xətti ossilyatorun koherent hallari üçün viqner funksiyasi
Ş.M.Nağiyev, G.H.Quliyeva, K.Ş.Cəfərova.....180
$TlInSe_2$ kristallarinda polimorf faza keçidi və fazalarin elektrofiziki xassələri
O.Z.Ələkbərov, A.İ.Nəcəfov, Q.Q.Hüseynov, A.P.Abdullaev.....189
Fİzika elminin başlanğicinda
N.B.Soltanova.....195
T BUĞA ulduzunun udulma spektri haqqında
N.X.Quliyev, O.V.Xəlilov, N.Z.İsmayilov.....206
Tipik Yeni HR DELFİN 1967 ulduzu parlaqliğinin maksimum fazasinin tədqiqi
M.B.Babayev, Ə.M.Xəlilov.....212

CONTENTS

Transverse magniresistance in a low-dimensional electron system at a scattering of charge carriers by impurity ions
B.M.Askerov, G.I.Guseynov, S.R.Figarova……3
Excitations of the surface and bulk spin waves in the magnetic-ordering crystals
M.N.Abdullayev……...…9
Ellipsometric study of lattice-mismatch induced elastooptic effect in ZnS/GaAs- and $CuGaS_2$/GaP - thin film/ substrate systems
X.N.Xalilova, D.I.Huseynova, S.V.Hamidov, V.N.Cafarova, Z.A.Jahangirli, G.S.Orudzhev, N.T.Mamedov……17
Band structure calculation of the GeSe compound by LCAO method and investigation of deep levels of the antisite defect Ge_{Se} and Se_{Ge}
Z.A.Jahangirli, G.S.Orudjev……...25
Investigation the adsorbed films of water on the hydrophobic surfaces by atomic-force microscopy methods
S.D.Alekperov……31
Influence of γ- irradiations on electric properties of $TlInS_2$<Cr> crystals
R.M.Sardarly, O.A.Samedov, I.I.Aslanov, A.P.Abdullaev, F.T.Almanov, M.M.Quluev.....37
The continuous dual HAHN polynomials and exact solution of the relativistic singular oscillator problem
S.M.Nagiyev, E.I.Jafarov, R.M.Imanov……41
The components distribution profile in InAs-GaAs mixed single crystals grown by conservative Bridgman method
P.G.Azhdarov, M.A.Akperov, V.K.Kyazimova, A.I.Alekperov……45
Formation of defects in iron-doped indium phosphide irradiated by γ-quanta
M.I.Aliev, Sh.Sh.Rashidova, M.A.Guseynova, I.M.Aliev, N.N.Qajieva.....49
Thermoelements for electric generators on *Bi* AND *Sb* based chalcogenides with intralayer nanostructures
F.K.Aleskerov, S.B.Bagirov, S.Sh.Kakhramanov, Q. Kavei……..52
State diagram of system TlS–FeS, TlSe–FeSe, and about the magnetic properties of $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$
R.G.Veliyev, E.M.Kerimova, F.M.Seyidov, R.Z.Sadixov, N.Z.Gasanov.....56
The excitation spektrum and the temperatur dependance of the photoluminesce intensity of the crystals $CaGa_2S_4$: Pr, Ce
S.A.Abushov……...62
Investigation of eksotic properties of nucleons in nuclei by the scattering of electrons and protons
M.M.Mirabutalybov.....66
Optical spectra $YbBi_2Te_4$ and $YbBi_4Se_7$
N.Z.Dzhalilov, M.A.Mahmudova.....71
Hysteresis at α↔β transition in Ag_2Se and Ag_2Te
F.F.Aliev, M.B.Jafarov, A.A.Saddinova, N.A.Verdiyeva……..76
The method for measuring energy and power of short pulses monochromatic radiation
A.A.Aliyev, N.D.Ismaylov, Sh.M.Kuliyev, A.K.Mamedov, R.I.Mukhtarova.....83
The polimorphik transformation in $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$ single crystals
A.F.Haziyeva, V.I.Nasirov, Y.G.Asadov, Y.I.Aliyev.....87
Electrical properties of the interface of PbTe<Tl> single crystal with In-Ag-Au alloy
T.D.Aliyeva, N.M.Akhundova, G.D.Abdinova, G.A.Akhmedova, D.Sh.Abdinov……...92
Influence of the annealing on electric properties of PbTe single crystals with excess lead
G.Z.Bagiyeva, N.B. Mustafayev, G.D.Abdinova, D.Sh.Abdinov……..96
Copper related deep acceptor complex in thermally treated $Ge_{1-x}Si_x$<Cu,Ga> crystals
L.A.Guseynli, Z.M.Zeynalov, Z.M.Zakhrabekova, G.Kh.Azhdarov……...100
Elektric and galvanomagnetic properties of $(Bi_2Te_3)_{0.96}(Bi_2Se_3)_{0.04}$ solid solutions doped by zincum and indium
X.B.Aliquliyeva, N.A.Abdullayev, S.Sh.Qahramanov, T.G.Kerimova, G.S.Mehdiyev, K.M.Mustafayeva.....106

Spatial structure and conformational properties of the creka peptide analogs
G.D.Abasova, I.N.Alieva, A.I.Omarova, N.M.Gojayev……...112
Optical constants of chalcogenide glass-like semiconductor of Se-As system doped by EuF_3
A.I.Isayev, S.I.Mekhtiyeva, S.N.Garibova, R.I.Alekperov, V.Z.Zeynalov.....121
Manifestation of light and heavy electrons in the galvanomagnetic characteristics of n-type $Bi_{0.88}Sb_{0.12}$ single crystals doped by Te
B.A.Tairov, O.I.Ibragimova, S.Z.Damirova, T.F.Yusifova.....127
The affect of the Y-Ba-Cu-O HTSC materials introduction in EPC-based composition on its physical-mechanical and electrophysikal properties
V.M.Alev……..133
Calculation of the effective fraction of missing neutrons and the life-time of incident neutrons for ZPR-359 (zero power reactor) composition
R.N.Mextieva, L.A.Taibov…….....139
Optical properties of InP doped by tin single crystals irradiated by γ-quanta
Sh.Sh.Rashidova.....143
Study of a purification process phenolic sewages by a method of ozonization
F.A.Teymurova, A.Y.Nzarova, F.Sh.Jafarova……..146
Substitution of solid solution in $TlInSe_2$-$TlYbSe_2$-system
M.M.Zarbaliev, N.F.Gahramanov, A.M.Ahmedova, A.B.Maharramov.....149
Definition of of the spin cut –off parameter of inelastic scattered neutrons
Kh.Sh.Adullayev, M.Sh.Mamedov, N.R.Memmedov……..156
The effect of *γ*-irradiation on dielectric coefficients and *AC*-conductivity of gallium selenide single crystals
S.N.Mustafaeva, M.M.Asadov, A.A.Ismailov……..159
Oscillation of low frequency currents in monocrystals of $Cu_3In_5S_9$
L.Hhasanova, A.Z.Mahammadov, S.A.Jahangirova.....163
Electroconductivity of $FeGa_2S_4$ in alternating electric field
N.N.Niftiyev, O.B.Taghiyev, Z.F.Hajiyeva, F.M.Mammadov……166
The first and second stage of process of diffusions in the threads of the fibroin of the molecule of fisetin
Y. H. Shukurlu……..169
Mathematical model superficial impendence in the microwave rectangular wave guide with irregular the narrow wall
R.J. Rasulov.....176
Wigner function for the coherent states of the relativistic linear oscillator in an external field
S.M.Nagiyev, G.H.Guliyeva, K.S.Jafarova.....180
Polymorphic transition in $TlInSe_2$ crystals and electrophysical properties of phases
O.Z.Lekperov, A.I.Najafov, G.G.Guseinov, A.P.Abdullayev……..189
At the beginnings of physical science
N.B.Soltanova……...195
On the absorption spectrum of T Tauri
N.Kh.Quliyev, O.V.Xalilov, N.Z.İsmailov.....206
Investigation of the maximal phase brightness of the typical Nova HR Delphinus 1967
M.B.Babayev, A.M.Khalilov……...212

СОДЕРЖАНИЕ

Поперечное магнитосопротивление низкоразмерной электронной системы при рассеянии на ионах примеси
Б.М.Аскеров, Г.И.Гусейнов, С.Р.Фигарова……..3
Поверхностные и объемные спиновые волны в сложных магнитоупорядоченных системах
М.Н.Абдуллаев…….....9
Эллипсометрическое исследование эластооптического эффекта, вызванного решеточным несоответствием в системах ZnS/GaAs и $CuGaS_2$/GaP тонкий слой/подложка
Х.Н.Халилова, Д.И.Гусейнова, С.В.Гамидов, В.Н.Джафарова, З.А.Джахангирли, Г.С.Оруджев, Н.Т.Мамедов.....17
Расчет зонной структуры соединений GeSe методом ЛКАО и исследование глубоких уровней антиструктурных дефектов Ge_{Se} и Se_{Ge}
З.А.Джахангирли, Г.С.Оруджев.....25
Исследование адсорбированных пленок воды на гидрофобных поверхностях методами атомно-силовой микроскопии
С.Д.Алекперов……...31
Влияние γ-облучения на проводимость кристаллов $TlInS_2$<Cr> в переменном поле
Р.М.Сардарлы, О.А.Самедов, И.И.Асланов, А.П.Абдуллаев, Ф.Т.Салманов, М.М.Кулиев……...37
Непрерывные дуальные многочлены Хана и точное решение задачи о релятивистском сингулярном осцилляторе
Ш.М.Нагиев, Э.И.Джафаров, Р.М.Иманов……41
Концентрационный профиль компонентов в монокристаллах твёрдых растворов InAs-GaAs, выращенных консервативным методом Бриджмена
П.Г.Аждаров, М.А.Акперов, В.К.Кязимова, А.И.Алекперов……...45
Дефектообразование гамма облученных кристаллов InP<Fe>
М.И.Алиев, Ш.Ш.Рашидова, М.А.Гусейнова, И.М.Алиев, Н.Н.Гаджиева……49
Термоэлементы для электрогенераторов на основе халькогенидов висмута и сурьмы с межслоевыми наноструктурами
Ф.К.Алескеров, С.Б.Багиров, С.Ш.Кахраманов, Г.Кавеи……....52
Диаграмма состояния систем TlS–FeS, TlSe–FeSe и о магнитных свойствах соединений $TlFeS_2$, $TlFeSe_2$
Р.Г.Велиев, Э.М.Керимова, Ф.М.Сеидов, Р.З.Садыхов, Н.З.Гасанов……..56
Спектр возбуждения и температурная зависимость интенсивности фотолюминесценции кристаллов $CaGa_2S_4$:Pr,Ce
С.А.Абушов……...62
Изучение экзотических свойств нуклонов в ядрах рассеянием электронов и протонов
М.М.Мирабуталыбов…….....66
Оптические спектры $YbBi_2Te_4$ и $YbBi_4Se_7$
Н.З.Джалилов, М.А.Махмудова……..71
Явление гистерезиса в Ag_2Se и Ag_2Te при $\alpha \Leftrightarrow \beta$ переходе
Ф.Ф.Алиев, М.Б.Джафаров, А.А.Саддинова, Н.А.Вердиева…….....76
Метод измерений энергии и мощности коротких импульсов монохроматического излучения
А.А.Алиев, Н.Д.Исмайлов, Ш.М.Кулиев, А.К.Мамедов, Р.И.Мухтарова……..83
Полиморфные превращения в монокристаллах $Rb_{0.975}Cs_{0.025}NO_3$
А.Ф.Хазиева, В.И.Насиров, Ю.Г.Асадов, Ю.И.Алыев.....87
Электрические свойства границ раздела монокристаллов PbTe<Tl> со сплавом In-Ag-Au
Т.Д.Алиева, Н.М.Ахундова, Г.Д.Абдинова, Г.А.Ахмедова, Д.Ш.Абдинов……....92
Влияние отжига на электрические свойства монокристаллов PbTe с избытком свинца
Г.З.Багиева, Н.Б.Мустафаев, Г.Д.Абдинова, Д.Ш.Абдинов……96
Глубокий акцепторный комплекс, связанный с примесью меди, в термообработанных кристаллах $Ge_{1-x}Si_x$ <Cu,Ga>
Л.А.Гусейнли, З.М.Зейналов, З.М.Захрабекова, Г.Х.Аждаров……..100

Электрические и гальваномагнитные свойства твёрдых растворов $(Bi_2Te_3)_{0,96}(Bi_2Se_3)_{0,04}$, легированных цинком и индием
Х.В.Алигулиева, Н.А.Абдуллаев, С.Ш.Кахраманов, Т.Г.Керимова, Г.С.Мехдиев, К.М.Мустафаева……..106
Пространственная структура и конформационные свойства аналогов пептида CREKA
Г.Д.Аббасова, И.Н.Алиева, А.И.Омарова, Н.М.Годжаев……...112
Оптические константы халькогенидной стеклообразной полупроводниковой системы Se-As, содержащей примеси фторида европия (EuF_3)
А.И.Исаев, С.И.Мехтиева, С.Н.Гарибова, Р.И.Алекперов, В.З.Зейналов……121
Энергетический спектр электронов в твердых растворах $Bi_{0.88}Sb_{0.12}$, легированных теллуром
Б. А.Таиров, О.И.Ибрагимова, С.З.Дамирова, Т.Ф.Юсифова……....127
Влияние введения Y-Ba-Cu-O ВТСП материала на физико-механические и электрофизические свойства композитов на основе этиленпропиленового каучука
В.М.Алиев……....133
Рассчеты эффективной доли тормозных нейтронов и времени жизни мгновенных нейтронов реактора ZPR-359
Р.Н.Мехтиева, Л.А.Таибов……139
Оптические свойства InP<Sn>, подвергнутых γ-облучению
Ш.Ш.Рашидова……...143
Исследование процесса очистки фенольных сточных вод методом озонирования
Ф.А.Теймурова, А.Я.Назарова, Ф.Ш.Джафарова……....146
Твердые растворы замещения в системе $TlInSe_2 - TlYbSe_2$
М.М.Зарбалиев, Н.Ф.Гахраманов, А.М.Ахмедова, А.Б.Магеррамов…….....149
Определение параметра спиновой зависимости неупругого рассеяния нейтронов
Х.Ш.Абдуллаев, М.Ш.Мамедов, Н.Р.Меммедов……156
Воздействие γ-облучения на диэлектрические коэффициенты и АС-проводимость монокристаллов селенида галлия
С.Н.Мустафаева, М.М.Асадов, А.А.Исмаилов……...159
Низкочастотные осцилляции тока в монокристаллах $Cu_3In_5S_9$
Л.Г.Гасанова, А.З.Магомедов, С.А.Джахангирова……..163
Электропроводность $FeGa_2S_4$ в переменном электрическом поле
Н.Н.Нифтиев, О.Б.Тагиев, З.Ф.Гаджиева, Ф.М.Мамедов.....166
Первый и второй этап диффузии в фиброиновых нитях физетиновой молекулы
Ю.Г.Шукюрлу……169
Математическая модель поверхностного импенданса в сверхвысокочастотном прямоугольном волноводе с нерегулярной узкой стенкой
Р.Дж.Расулов……...176
Функция Вигнера для когерентных состояний релятивистского линейного осциллятора во внешнем поле
Ш.М.Нагиев, Г.Г.Кулиева, К.Ш.Джафарова……....180
Полиморфное превращение в кристаллах $TlInSe_2$ и электрофизические свойства фаз
О.З.Алекперов, А.И.Наджафов, Г.Г.Гусейнов, А.П.Абдуллаев……189
У истоков физической науки
Н.Б.Солтанова……195
Об абсорбционном спектре Т Тельца
Н.Х.Гулиев, О.В.Халилов, Н.З.Исмаилов…….....206
Исследование максимальной фазы блеска типичной Новой звезды HR Дельфина 1967
М.Б.Бабаев, А.М.Халилов……..212