

ISSN 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 XXXI

№5

<<ELM>> NƏŞRİYYATI

<<ELM>>PUBLISHERS

BAKİ – 2011 - BAKU

REDAKSIYA HEYYƏTİ

A.Hacıyev- baş redaktor, Ə.Abbasov, C.Allahverdiev, Ç.Qaçar, N.Quliyev, M.Əliyev, T.Əliyev, F.Əliyev, İ.İbrahimov, M.Kərimov, A.Mehdiyev, A.Paşayev, K.Ramazanov, F.Həşimzadə, E.Salayev.

BURAXILIŞIN REDAKSIYA 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.Naqiyev- 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 yazılan dildə qısa xülasə çap edilir. Nəşr olunmaq üçün göndərilən məqalələr 210x297mm ölçülü ağ kağızın bir üzündə olmaqla, 1 intervalla lazımi sahə saxlanmasına əməl etməklə (yuxarıdan – 30mm, soldan – 20mm, aşağıdan – 30mm, sağdan -20mm), mətdəki şrift normal, düzünə 12, sərlövhə - yağlı – 12, müəlliflər – yağlı -12, müəssisə, poçt ünvanları, telefon, e-mail, – normal 12 iki interval buraxmaqla çap edilir. Məqalələr 2 nüsxədə və CD diskdə Microsoft WordTM formada (şrift-Times New Roman) təqdim olunmalıdır. Çapa qəbul olunmayan məqalələr geri qaytarılmır. Məqalələr işin yerinə yetirildiyi təşkilatın məktubu ilə redaksiyaya qəndərlməlidir.

1. TITUL SƏHİFƏSİ.

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

2. ƏDƏBİYYAT.

Ədəbiyyat siyahısı məqalədə qeyd olunan ardıcılıqla və aşağıdakı qaydada yazılır:

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

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

3. XÜLASƏ.

Xülasə ayrı vərəqdə digər 2 dildə çap edilir. Xülasənin həcmi 60-70 sözü keçməməlidir.

4. ŞƏKİLLƏR.

Şəkillər ağ kağızda dəqiq və aydın çəkilməli və ya fotosəkil 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 göstərilir. Şəkillərdə aydınlaşdırıcı mətn və şəkilaltı ifadələr olmamalıdır. Qrafiklərin koordinat oxlarında kifayət qədər az sayda rəqəm olmalı, oxların adı iri və aydın, dəqiq göstərməlidir. Əgər qrafikdə bir neçə əyri verilmişsə, onda onları nömrələmək və nömrələrin izahı şəkil altı yazılarda verilməlidir. Bu əyriyələrin müxtəlif işarələrlə göstərilməsinə icazə verilmir. Sİ SİSTEMİNDƏ QÖSTƏRİLƏN VAHİDLƏR İNQİLİS DİLİNDƏ OLMALIDIR. Məqalədə şəkillərin sayı 5-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 qəndərlilir:

Azərbaycan, AZ 1143, Bakı, Hüseyn Cavid prospekti, 33, MEA H.M.Abdullayev adına Fizika institutu.

Tel: (99412) 439-33-15, Faks: (99412)447-04-56; E-mail: jtransaction@physics.ab.az; almaz@physics.ab.az; internet: www.physics.gov.az

Fizika institutunda çap üçün hazırlanmışdır .

УДК 6787.077

**РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛА TlFeS_2 В
ФЕРРОМАГНИТНОЙ ФАЗЕ**

**З.А.ДЖАХАНГИРЛИ^{1,4*}, КОДЖИРО МИМУРА², КАЗУКИ ВАКИТА³,
ЕНГ ШИМ², Г.С.ОРУДЖЕВ⁴, Н.Т.МАМЕДОВ²**

Институт Физики НАН Азербайджана¹

AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавид, 33

*Department of Physics and Electronics, Graduate School of Engineering, Osaka
Prefecture University²*

Gakuen-cho 1-1, Sakai, Osaka 599-8531, Japan

Department of Electronics and Computer Engineering,

Chiba Institute of Technology³, 2-17-1,

Азербайджанский технический университет⁴

AZ 1073, Баку, пр. Г.Джавид, 25

** cahanzakir@yahoo.com*

поступила 12.01.2011
принята к печати 22.08.2011

РЕФЕРАТ

Представлены результаты теоретического исследования электронной структуры кристаллического TlFeS_2 методом функционала плотности с GGA (обобщенная градиентная аппроксимация) обменно-корреляционным потенциалом в базисе линейаризованных плоских волн (LAPW). На основе анализа энергетического спектра и плотности энергетических состояний показано, что химическая связь в TlFeS_2 имеет металлический характер. Металлическая компонента химической связи обусловлена локализованными на атоме железа 3d-электронами с энергиями вблизи уровня Ферми.

Ключевые слова: DFT, GGA, LAPW, спинтроника, ферромагнетики

Спинтроника - новое направление в микроэлектронике, базирующееся на квантово-механической характеристике электронов, как спине. Устройства, созданные на ее основе, отличаются от подобных устройств микроэлектроники энергонезависимостью, уменьшением энергопотребления, увеличением плотности логических элементов и скорости обработки данных. В настоящее время идет активная работа над созданием магнитных полупроводников, которые могут быть использованы в спинтронике. Уникальные физические свойства магнитных полупроводников связаны с наличием в их зонной структуре особенностями, которые образуются электронными d- и f-оболочками атомов переходных или редкоземельных элементов.

Наличие сильной анизотропии в межатомных взаимодействиях, а также сочетание полупроводниковых и магнитных свойств вызывает интерес к цепочечным соединениям типа TlFeS_2 . Эти кристаллы являются перспективными материалами для применения в спинтронике.

Квазиодномерное соединение TlFeS_2 кристаллизуется в параметрической структуре с пространственной группой симметрии $C_{2/m}(C_{2h}^3)$ моноклинной сингонии [1]. Расслаивание таких монокристаллов на тонкие пластины перпендикулярные только одному из кристаллографических направлений без больших механических усилий свидетельствует о том, что силы связей между

атомами носят сильно анизотропный характер. Элементарная ячейка кристалла содержит четыре формульные единицы. Преобразование одного атома Fe в другой происходит операцией инверсии. Атомы Ti и S расположены в стандартных положениях 4(i), а атомы Fe в положении 4(g). Анализируя результаты экспериментов по магнитной восприимчивости и зависимости электрического сопротивления от температуры монокристалла TiFeSe_2 , авторы работы [2] пришли к выводу, что этот кристалл является антиферромагнитным полупроводником. Проведенные нами расчеты методом теории функционала плотности в приближении обобщенной градиентной аппроксимации действительно подтверждают, что эти кристаллы являются антиферромагнитным полупроводником. При исследовании электронной структуры этих соединений необходимо учесть релятивистические эффекты, электронную корреляцию и магнитное упорядочение электронов незаполненных оболочек атома Fe, которому в основном состоянии соответствует конфигурация валентных электронов $3d^6 4s^2$. Электронный спектр носителей заряда в TiFeSe_2 исследован ранее в работе [3,4] методом эмпирического псевдопотенциала, в котором d-электроны атома железа в качестве валентных не учитываются.

До настоящего времени кристаллическое соединение TiFeSe_2 теоретически мало исследовано. В данной работе методом функционала плотности с использованием LAPW [5] исследована электронная структура кристаллического соединения TiFeSe_2 в ферромагнитной фазе. В наших расчетах учтен тот факт, что основное состояние атома железа является состоянием с незаполненной оболочкой, для которой существенны эффекты спиновой поляризации. Выбирая направление спина d-электронов атома Fe, исследовали зависимость полной энергии на ячейку E_{tot} от значения проекции полного спина S_z . Расчеты проводились с помощью пакета программ WIEN2k [6]. Сходимость самосогласованных итераций была порядка 1мэВ для 418 k-точек внутри приведенной зоны Бриллюэна. При этом состояния с энергией меньше -6Ry принимались как основные состояния. Полученные результаты позволяют установить характер локализации d-электронов в этом кристалле и их роль в образовании химической связи.

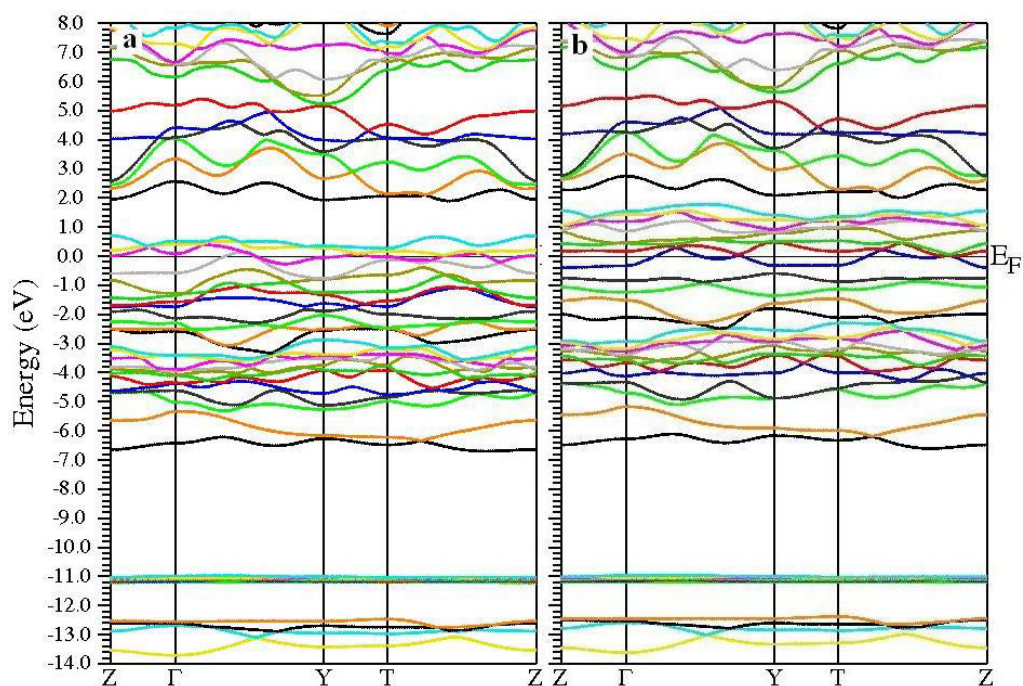


Рис. 1.

Зонная структура TiFeSe_2 для: а- “spin-up”, б- “spin-down” поляризаций

На Рис. 1 показана рассчитанная зонная структура TlFeS_2 в ферромагнитной фазе. Из рисунка видно, что этот кристалл в ферромагнитной фазе является металлическим соединением для обеих поляризаций спина.

В Таблице 1. приведены значение полной энергии E_{tot} на ячейку для шести значений проекции полного спина S_z . Как видно из таблицы, основному состоянию соответствует проекции спина $S_z=5$. Анализ плотности энергетических состояний (Рис.2) и состава соответствующих орбиталей показывает, что электроны с неспаренным спином занимают 3d-орбитали атома железа, а соответствующие одноэлектронные энергии находятся вблизи уровня Ферми.

Таблица 1.

Зависимость полной энергии на ячейку от проекции полного спина

S_z	6	5	4	3	2	1	0
E_{tot}	-894440.280	-894440.301	-894440.295	-894440.285	-894440.285	-894440.211	-894440.157

Из сравнения рассчитанных полных энергий для разных проекций полного спина можно сделать вывод, что спаривание шести 3d-электронов атома Fe ($S_z=0$) является энергетически невыгодным.

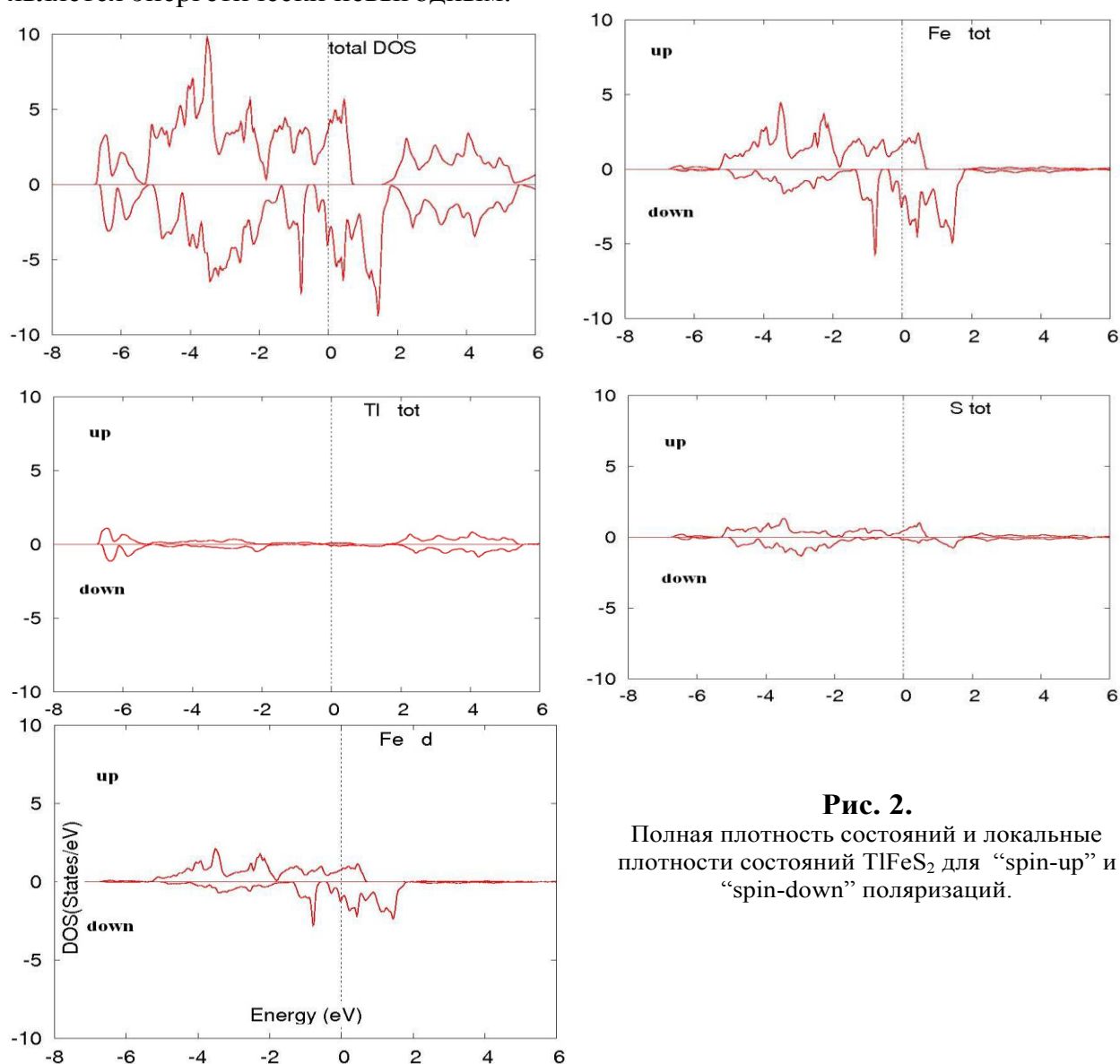


Рис. 2.

Полная плотность состояний и локальные плотности состояний TlFeS_2 для “spin-up” и “spin-down” поляризаций.

Следует отметить, что разница в энергии на ячейку для состояний с $S_z=5$ и $S_z=4$ составляет всего 0,006Ry, и поэтому нельзя полностью исключить возможность такой электронной конфигурации, в которой значение проекции полного спина $S_z=4$

Таблица 2.

“Muffin-tin” радиусы, расстояние до ближайших соседей, сумма “muffin-tin” радиусов ближайших соседей и заряд атомов в “muffin-tin” сфере.

	$R_{MT}(a.u.)$	ближайший сосед/расстояние (a.u.)	сумма R_{MT}	заряд в МТ сфере
Tl	2,5	$S_1 - 5.84925$	4.46	5.04162
Fe	2.21	$S_2 - 4.19643$	4.17	5.3288
S_1	1.96	$Fe - 4.21755$	4.17	1.8389
S_2	1.96	$Fe - 4.19643$	4.17	1.8421

В Таблице 2. приведены “muffin-tin” радиусы, расстояние до ближайших соседей, сумма “muffin-tin” радиусов ближайших соседей и заряд атомов в “muffin-tin” сфере. Из Таблицы 2 видно, что “muffin-tin” сферы атомов Fe и S почти соприкасаются. Существенное отличие заряда в “muffin-tin” сфере атома S, по сравнению с другими атомами, дает возможность сделать вывод, что эффекты ионности достаточно велики и химическую связь в кристалле $TlFeS_2$ в ферромагнитной фазе можно представить в виде ионно-металлической. Авторы выражают благодарность академику Ф.М. Гашимзаде за неоднократное обсуждение результатов.

1. M.Zabel, K.J.Range, *Ternare fазen in system eisentallium-schwefel*, *Z. Natur.*, **34 B** (1979) 1-6.
2. Z.Seidov, H.-A.Krug von Nidda, J.Hemberger, A.Loidl, G.Sultanov, E.Kerimova, A.Panfilov, *Magnetic susceptibility and ESR study of the covalent-chain antiferromagnets $TlFeS_2$ and $TlFeSe_2$* , *Phys.Rev B*, **65** (2001) 014433-1-014433-7.
3. Г.С.Оруджев, Н.А.Алиева, З.А.Джахангиров, *Препринт №114 НПО КИ г.Баку*, (1991) 1-12
4. Г.С.Оруджев, Д.Г.Гулиев, З.А.Джахангиров, *Расчет энергетических спектров и плотности электронных состояний кристаллов $TlFeS_2$ и $TlFeSe_2$* Тезисы докладов XXX Международной конференции «Материалы и химические превращения под давлением», г. Баку, (1992) 15-18.
5. David J.Singh, *Plane Waves, Pseudopotentials and the LAPW Method*, *Kluwer Academic Publishers, Boston*, (1994) 225.
6. P.Blaho, K.Schwarz, J.Luitz, WIEN2k, *A Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Package for Calculating Crystal Properties*, *Karlheinz Schwarz, Techn. Universitat Wien, Austria*, (1999) ISBN 3-9501031-0-4.

$TlFeS_2$ KRISTALININ ELEKTRON QURULUŞUNUN FERROMAQNIT FAZADA HESABLANMASI

ZA.A.CAHANGIRLI, KOJIRO MIMURA, KAZUKI WAKITA, YONGGU SHIM, H.S.ORUCOV, N.T.MƏMMƏDOV

Sıxlıq funksionalı nəzəriyyəsiindən istifadə etməklə LAPW bazasında GGA mübadilə-korrelyasiya potensialı yaxınlaşmasında $TlFeS_2$ kristalının elektron quruluşu tədqiq edilmişdir. Elektron quruluşunun və energetik hal sıxlığının analizi göstərir ki, bu kristalda kimyəvi rabitə metallik xarakter daşıyır. Metallik rabitə Fermi səviyyəsi ətrafında yerləşən dəmir atomlarının 3-d elektronları vasitəsilə yaranır.

**Z.A.CAHANGIRLI, KOJIRO MIMURA, KAZUKI WAKITA, YONGGU SHIM, H..S.ORUDJEV,
N.T.MAMEDOV**

Results of theoretical investigation of electronic structure of TlFeS_2 crystal using density functional theory with GGA exchange-correlation potential in basis of LAPW have been shown. On the basis of the analysis of electronic structure and density of states has been shown, that chemical bonding in TlFeS_2 has had metallic character. Metallic component of chemical bonding has been caused by 3d-electrons located on iron atoms with energy near to Fermi's level.

Редактор: М.Бабаев

УДК 621.385.833

ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ АСМ-ИЗОБРАЖЕНИЙ ПРИ НАЛИЧИИ СЛОЕВ ПОВЕРХНОСТНОГО АДсорБАТА

С.Д.АЛЕКПЕРОВ^{1,2}

Филиал МГУ им. М.В. Ломоносова в г. Баку¹

AZ 1141, Баку, ул. Ф.Агаева, 14

Институт физики НАН Азербайджана²

AZ 1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33

sdalekperov@mail.ru

поступила 17.01.2011
принята к печати 12.05.2011

Ключевые слова:

атомно-силовая микроскопия, зондовая
микроскопия, силовые кривые,
пленки жидкого адсорбата,
адсорбционные пленки

РЕФЕРАТ

В работе проанализированы артефакты, возникающие при исследовании поверхности методом атомно-силовой микроскопии. Рассмотрены процессы, происходящие в системе «зонд–молекулы воды–поверхность графита». Произведена оценка параметров зонда и окружающей среды, а также степени влияния этих параметров на поверхность при сканировании.

ВВЕДЕНИЕ

Количественное определение характеристик материалов на воздухе с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ) остается достаточно сложным делом. Наиболее общая проблема состоит в том, что поверхность образца, находящегося на воздухе, обычно бывает покрыта адсорбированными парами воды. Когда зонд касается этой пленки, образующийся мениск создает дополнительное поверхностное натяжение, притягивающее зонд к поверхности. А это, в свою очередь, может существенно исказить результаты исследований, поскольку при этом меняются все параметры самих силовых кривых (СК) [1, 2]. В данной работе проведен анализ степени влияния параметров зонда и характеристик внешней среды на параметры получаемых в ходе эксперимента СК. Основным объектом рассмотрения являлась система «зонд–молекулы воды–поверхность графита». Во всех экспериментах в качестве образцов использовались свежие сколы пиролитического графита. Это связано с тем, что на поверхности графита можно 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, получаемые АСМ. Измерения проводились в специальной камере в диапазоне температур $(20\div 22)^\circ\text{C}$ и в диапазоне относительной влажности окружающей среды $5\%\leq p/p_s\leq 96\%$ (относительная влажность измерялась на термогигрометре “Wendox” с точностью $\sim 1\%$). Фактически были выбраны три диапазона относительной влажности: пониженная влажность $5\%\leq p/p_s\leq 10\%$; нормальная влажность $40\%\leq p/p_s\leq 60\%$ и повышенная влажность $80\%\leq p/p_s\leq 96\%$. Для исключения процесса переноса воды с зонда на поверхность и наоборот использовался гидрофобный пирамидальный зонд из нитрида кремния (Si_3N_4). Применялись серийные зонды типа CSG10, имеющие следующие параметры (согласно паспортным данным): R (радиус острия) = 30 нм; θ (угол конусности острия) = 20° ; k_c (жесткость кантилевера) = 0,2 Н/м;

f_0 (резонансная частота)=27кГц; H (высота зонда)=18μm; $L \times W \times t$ (размеры кантилевера)=250×35×1,3μm.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ЗОНДА

Степень влияния самого зонда на параметры СК определяется, в основном, двумя факторами: 1). эффект влияния геометрии зонда, 2). эффект конденсации молекул воды в точке контакта зонда с поверхностью [3]. Чтобы исключить влияние первого фактора, во всех экспериментах использовались зонды с одними и теми же, приведенными выше, параметрами. Чтобы определить степень влияния второго фактора, был проведен следующий эксперимент. Поверхность графита предварительно была исследована в контактном режиме (т.е. в режиме “С-AFM”), что показало атомарно-гладкую поверхность, на которой встречались лишь ступеньки высотой в несколько ангстрем и отдельные точечные дефекты. Затем выбранный участок графита сканировался в режиме “MD-AFM” [4]. Как оказалось,

при повышенной влажности, контакт зонда с поверхностью вызывал процесс конденсации или переноса на поверхность дополнительных молекул воды, что приводило к образованию капиллярного мениска вокруг контактной точки. Процесс конденсации и формирования мениска был зарегистрирован при непрерывном снятии СК в одной точке с интервалом в 30 секунд. На Рис.1 изображены в одном масштабе СК подвода, полученные во время этого процесса.

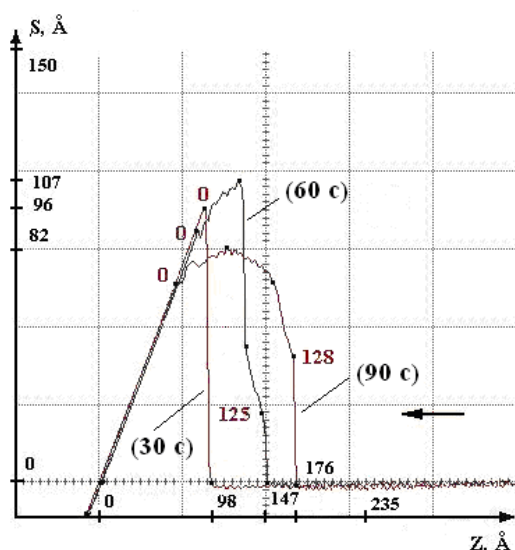


Рис. 1.

Силовые кривые, полученные с интервалом 30 секунд в одной точке поверхности графита в условиях повышенной влажности ($80\% \leq p/p_s \leq 96\%$). СК получены после контакта зонда с поверхностью.

Цифрами обозначены расстояния от поверхности до зонда, расположенного в этих точках. Кривая (30с) показывает отсутствие в точке измерения молекул воды в конденсированном состоянии. Кривая (60с) снималась уже на небольшом, находящемся в процессе роста, капиллярном мениске. На кривой подвода прилипание зонда к капле происходит в два этапа – в процессе прыжка зонд, пролетев 22Å (участок $147 \div 125\text{Å}$), сталкивается с небольшим препятствием, а затем свободно продолжает свое движение в сторону поверхности графита. Очевидно, небольшой формирующийся мениск конденсированной воды под влиянием тех же Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий отрывается от поверхности графита и устремляется навстречу острию зонда. Так как после замедления скачка СК очень резко уходит вверх, то это не позволяет интерпретировать данную ситуацию как процесс прохождения зонда через слой самого мениска, ускоренный вдобавок капиллярными силами. Дело в том, что Ван-дер-Ваальсовы взаимодействия между поверхностью графита и зондом внутри жидкой среды не приводят к большим скачкам. После контакта с молекулами капиллярного мениска происходит постепенное втягивание в него зонда. При этом изгиб кантилевера увеличивается, а участок СК снова уходит вверх. Кривая (90с) получена уже на сформированном мениске. До контакта с молекулами мениска зонд пролетает расстояние в 48Å (участок $176 \div 128\text{Å}$), причем, область втягивания зонда в объем

мениска хорошо выражена. Следующий за участком втягивания на СК (60с) и (90с) наклонный вниз участок означает сопротивление капиллярного мениска прохождению зонда. Завершает процесс прохода зонда также на всех трех кривых небольшой скачок вверх, который в этом случае может означать попадание зонда под влияние Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий со стороны поверхности графита и последующий контакт с ней. Как показали эксперименты, форма СК изменяется только в интервале времени до 90 секунд, после чего стабилизируется. Это свидетельствует о конечном времени процесса конденсации и наступлении термодинамического равновесия.

ВЛИЯНИЕ ПАРАМЕТРОВ ОКРУЖАЮЩЕЙ СРЕДЫ

Из всех характеристик внешней среды при экспериментах на воздухе с помощью АСМ фактором первого порядка является величина относительной влажности (p/p_s). Дело в том, что в зависимости от уровня влажности, слой адсорбированной воды на поверхности будет иметь неодинаковую толщину и различный характер распределения [5]. Поскольку твердое тело посредством образования водородных связей как бы «программирует» изменения во взаимном расположении молекул воды в приповерхностном слое, а образованные межмолекулярные водородные связи распространяют эти изменения на расстояния ≥ 10 нм, то стабильность адсорбированного слоя на поверхности оказывается достаточно высокой. Фактически, здесь имеет место своеобразное эпитаксиальное влияние на расположение молекул воды в граничном слое со стороны твердого тела. На Рис.2 приведены СК подвода, снятые на поверхности графита при пониженной, нормальной и повышенной влажности.

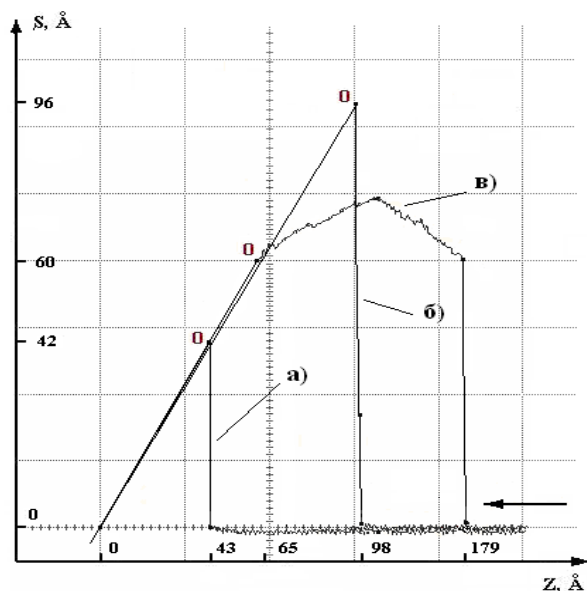


Рис. 2.

Силловые кривые подвода, снятые при: а) пониженной ($5\% \leq p/p_s \leq 10\%$) и нормальной ($40\% \leq p/p_s \leq 60\%$) влажности; б) при повышенной влажности ($80\% \leq p/p_s \leq 96\%$) вне капель; в) при повышенной влажности ($80\% \leq p/p_s \leq 96\%$) на каплях.

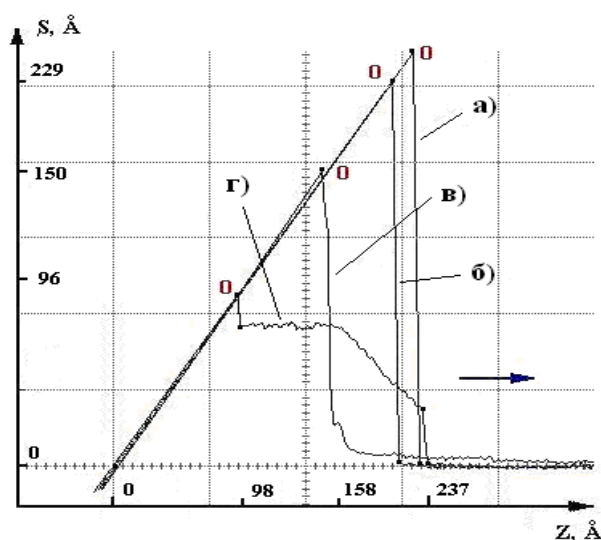


Рис. 3.

Силловые кривые отвода зонда от поверхности графита: а) при пониженной влажности ($5\% \leq p/p_s \leq 10\%$); б) при нормальной влажности ($40\% \leq p/p_s \leq 60\%$); в) при повышенной влажности вне центров конденсации ($80\% \leq p/p_s \leq 96\%$); г) при повышенной влажности на центрах конденсации ($80\% \leq p/p_s \leq 96\%$).

В условиях пониженной и нормальной влажности (Рис.2,а), как видно из СК, зонд, проходя молекулярный слой воды, свободно доходит до механического контакта непосредственно с поверхностью графита, а затем также беспрепятственно отрывается от нее (это отражает характерная треугольная форма СК). В данном случае СК показывает отсутствие каких-либо препятствий зонду при подходе к поверхности и при контакте с ней говорит о высокой подвижности данного молекулярного слоя воды и отсутствии капиллярных эффектов. Состояние этого хорошо подвижного «неконденсированного» слоя воды скорее можно отнести к квазидвумерному пару (т.к. толщина все-таки есть), нежели к слою жидкости. В условиях повышенной влажности форма СК, снятых вне центров конденсации (Рис.2,б), совпадает с формой СК, снятых при условиях пониженной и нормальной влажности (Рис.2,а), т.е. и в этом случае, как показывает форма СК, адсорбированный слой воды находится в высокоподвижном («газообразном») состоянии. СК, снятые непосредственно на самих центрах конденсации (Рис.2,в), резко изменяли свою форму, т.к. имели характерные области прохождения зондом самого центра конденсации и выхода из нее. Форма этих СК показывает, что вода внутри центров оказывала сопротивление прохождению зонда, что свидетельствовало о ее жидком состоянии, т.е. наличие капиллярных эффектов. Состояние воды в этих центрах, очевидно, можно назвать конденсированной жидкостью. Кроме этого, в зависимости от уровня влажности окружающей среды заметно меняется характер распределения сил адгезии на поверхности, что тоже влияет на АСМ-изображения поверхности, изменяя силу взаимодействия в системе «зонд-поверхность» [6]. На Рис.3 представлены СК отвода при различных уровнях влажности: пониженной (а), нормальной (б), повышенной вне центров конденсации (в), повышенной на центрах конденсации (г). Все результаты приведены в Таблице 1.

Таблица 1.

Относительная влажность, (p/p_s), %	$5\% \leq p/p_s \leq 10\%$	$40\% \leq p/p_s \leq 60\%$	$80\% \leq p/p_s \leq 96\%$	
			вне центров конденсации	на центрах конденсации
Общая толщина слоя адсорбата (зонд+поверхность), нм	$(5,1 \div 5,5) \pm 0,4$	$(4,3 \div 4,8) \pm 0,4$	$(9,2 \div 9,8) \pm 0,6$	$(17,3 \div 17,9) \pm 0,8$
Толщина слоя поверхностного адсорбата, нм	$(3,0 \div 3,2) \pm 0,3$	$(2,6 \div 2,9) \pm 0,3$	$(4,4 \div 4,7) \pm 0,5$	$(8,3 \div 8,7) \pm 0,7$
Средняя сила адгезии, $\text{Н} \times 10^{-9}$	$(6,5 \div 6,9) \pm 0,3$	$(6,1 \div 6,4) \pm 0,3$	$(4,2 \div 4,5) \pm 0,2$	$(2,9 \div 3,3) \pm 0,2$

Относительная толщина пленки воды при влажности ($5\% \leq p/p_s \leq 10\%$) составляла $\sim 3,1$ нм, а средняя величина адгезионной силы оказалась равной $\sim 6,7 \times 10^{-9}$ Н. При влажности ($40\% \leq p/p_s \leq 60\%$) относительная толщина пленки воды составила $\sim 2,7$ нм, а средняя величина адгезионной силы была равна $\sim 6,2 \times 10^{-9}$ Н. Другими словами, при повышении влажности от ($5 \div 10\%$) до ($40 \div 60\%$) относительная толщина пленки адсорбированной воды, наоборот, уменьшилась с 3,1 нм до 2,7 нм. Это говорит о том, что в условиях пониженной влажности на поверхности графита практически полностью отсутствуют молекулы воды, и характерная гистерезисная форма СК определяется Ван-дер-Ваальсовыми взаимодействиями, отличными от процесса силового взаимодействия в системе «зонд-вода-графит» [7]. Кроме того, как оказалось, при увеличении влажности величина адгезионной силы между поверхностью графита и зондом также стала убывать. При повышении влажности с ($5 \div 10\%$) до ($40 \div 60\%$), величина силы адгезии уменьшилась на $\approx 7\%$. Данный эффект можно объяснить влиянием пленок

адсорбированной воды на гидрофобные поверхности графита и зонда из нитрида кремния (перед измерениями зонд был очищен). При влажности ($80\% \leq p/p_s \leq 96\%$) формы СК, снятых вне центров конденсации (Рис.3,в), в общем и целом, совпадают с формой СК, снятых при пониженной и нормальной влажности. Это доказывает, что пленка адсорбированной воды находится в высокоподвижном газообразном состоянии. Относительная толщина пленки воды при этом увеличилась до 4,5нм, а величина силы адгезии составила $\sim 4,3 \times 10^{-9}$ Н. Совсем другой вид имеет СК, снятая непосредственно на самом центре конденсации (Рис.3,г). Непосредственно на самих центрах конденсации регистрировались низкие значения сил адгезии, которые в среднем составили $\sim 3,1 \times 10^{-9}$ Н при средней высоте капель воды $\sim 8,5$ нм. Достаточно большой диапазон изменения сил адгезии от $\sim 4,3 \times 10^{-9}$ Н вне центров конденсации до $\sim 3,1 \times 10^{-9}$ Н на самих центрах конденсации (т.е. $\Delta F = 1,2 \times 10^{-9}$ Н) связан, по-видимому, не с топографией поверхности, а определяется наличием дополнительных капиллярных сил внутри центров конденсации [8]. Резкое уменьшение величины сил адгезии на центрах конденсации можно объяснить следующим образом. В данном случае при росте толщины пленки адсорбированной воды наличествует, так называемый, геометрический эффект [9]: с увеличением толщины пленки воды “текущей” увеличивается “текущий” радиус гидрофобного зонда на границе раздела «воздух-жидкость». Это, в свою очередь, увеличивает выталкивающую капиллярную силу, что, в итоге, приводит к уменьшению величины силы адгезии внутри центров конденсации. Общая толщина слоя адсорбата, приведенная в Таблице 1 – это суммарная толщина слоя адсорбата на острие зонда и слоя поверхностного адсорбата. Чтобы получить отдельно толщину слоя поверхностного адсорбата, надо каким-то образом «отделить» тот вклад, который вносит сюда слой адсорбата на острие зонда. Для этого был проведен отдельный эксперимент, результаты которого приведены в Таблице 2.

Таблица 2.

Относительная влажность, (p/p_s), %	$5\% \leq p/p_s \leq 10\%$	$40\% \leq p/p_s \leq 60\%$	$80\% \leq p/p_s \leq 96\%$	
			вне центров конденсации	на центрах конденсации
Общая толщина слоя адсорбата (зонд+поверхность), нм	$(4,2 \div 4,6) \pm 0,2$	$(3,3 \div 3,8) \pm 0,2$	$(9,6 \div 10,2) \pm 0,4$	$(18,0 \div 18,4) \pm 0,6$
Толщина слоя поверхностного адсорбата, нм	$(2,1 \div 2,3) \pm 0,2$	$(1,7 \div 1,9) \pm 0,2$	$(4,8 \div 5,1) \pm 0,3$	$(9,0 \div 9,2) \pm 0,4$

В качестве образца была взята кремниевая пластина, покрытая естественным оксидом SiO_2 (для того чтобы материалы образца и зонда совпадали). Был проведен весь цикл экспериментов при различных величинах относительной влажности. После этого (пренебрегая эффектом влияния геометрии зонда и возможными различиями в состоянии поверхности и уровне легирования) уже можно было определить толщину слоя адсорбата на острие и на поверхности просто путем деления на 2 полученного значения общей толщины адсорбата. Определенная таким образом толщина слоя адсорбата на острие зонда вычиталась из общей толщины адсорбата, что, в итоге, давало возможность определить толщину слоя поверхностного адсорбата.

Таким образом, при повышенной влажности зонд на поверхности сам становится центром конденсации водяных паров, и вокруг него образуется капиллярный мениск, который он сам и исследует. Вдобавок, различные уровни влажности дают совершенно разные по своим характеристикам слои поверхностного адсорбата. Все это может служить причиной наличия артефактов

при исследовании поверхности с помощью АСМ и, как следствие, вызывать большие трудности при интерпретации полученных данных.

1. G.K.Zhavnerko, V.N.Staroverov, V.E.Agabekov, *Interpretation of SPM images of Langmuir-Blodgett films based on long-chain carboxylic acids*, *Thin Solid Films*, **359** (2000) 98-103.
2. A.V.Bolshakova, O.I.Kiselyova, A.S.Filonov, *Comparative studies of bacteria with atomic force microscopy operating in different modes*, *Ultramicroscopy*, **86** (2001) 121-128.
3. С.И.Васильев, Ю.Н.Моисеев, А.И.Орешкин, *Исследование поверхности палладия методом сканирующей туннельной микроскопии*, *Письма в ЖЭТФ*, **57** (1993) 309-312.
4. С.П.Молчанов, В.В.Дремов, А.П.Кирпичников, *Способ сбора и обработки информации с поверхности образца*, *Патент № 2145055, Российская Федерация*, (1999).
5. А.Н.Булатов, С.В.Хартов, *Исследование адсорбата воздуха на твердотельных подложках методами атомно-силовой микроскопии*, *Известия вузов. Электроника*, № 4 (2004) 9-16.
6. A.V.Bolshakova, I.A.Golutvin, N.S.Nasikan, *Determination of mechanical characteristics of surface of block copolymers of atomic force microscopy techniques*, *Polymer Science, Ser. A*, **46** (2004) 926-932.
7. О.В.Синицына, И.В.Яминский, *Зондовая микроскопия поверхности графита с атомным разрешением*, *Успехи химии*, **75** (2006) 27-35.
8. Д.С.Сайко, В.В.Ганжа, С.А.Титов, *Адсорбционные слои воды на поверхности тонких пленок оксида аммония*, *Журнал технической физики*, **79** вып.12 (2009) 86-91.
9. Е.А.Образцова, Е.Д.Образцова, И.В.Яминский, *Атомно-силовая микроскопия поверхности графита с атомным разрешением*, *Сборник тезисов IV международной конференции «Современные достижения бионаноскопии»*, Москва, 15-18 июня (2010) 53-54.

SƏTHİN ÜZƏRİNDƏ ADSORBAT LAYLARI OLDUĞU HALDA AQM TƏSVİRLƏRİNİN FORMALAŞMASININ XÜSUSİYYƏTLƏRİ

S.C.ƏLƏKBƏROV

Məqalədə atom-qüvvə mikroskopiya metodu ilə səthin tədqiqi zamanı təzahür edən artefaktlar araşdırılmışdır. “Zond – su molekulları – qrafit səthi” sistemində olan proseslərə baxılmışdır. Zondun və ətraf mühitin parametrləri, eyni zamanda bu parametrlərin skan zamanı səthə təsir dərəcəsi qiymətləndirilmişdir.

AFM IMAGES FORMATION PECULIARITIES IN THE PRESENCE OF LAYERS OF A SURFACE ADSORBATE

S.D.ALEKPEROV

The artifacts arising at surface scanning by method of atomic force microscopy have been analyzed. The processes occurring in system “probe–molecules of water–graphite surface” have been considered. The estimation of parameters of probe and of environment, also a degree of influence of these parameters on a surface has been made at scanning.

Редактор: Х.Везилов

PACS: 621.315.592

INVESTIGATION OF RADIATION HARDNESS OF MICRO-PIXEL AVALANCHE PHOTODIODES (MAPD)

F.I.AHMADOV^{1,2}, R.S.MADATOV², Z.Y.SADYGOV¹, Y.M.MUSTAFAEV²

¹*Frank Laboratory of Neutron Physics, Joint Institute of Nuclear Research
141 980, Russia, Moscow region, Dubna, J. Curie, 6*

²*Institute of Radiation Problems ANAS
AZ 1143, Baku, F. Aghayev str., 9*

received: 27.04.2011
accepted: 11.06.2011

Keywords: photoconductivity, APD,
defect, protons and α -particles

ABSTRACT

The work has been dedicated to the investigation of radiation damages caused by the beam of alpha particles and protons in micro-pixel avalanche photodiodes (MAPD). The results of the investigation show that the beam of alpha particles and protons of $6.1 \cdot 10^8 \alpha/\text{cm}^2$ and $1.0 \cdot 10^{10} \text{proton}/\text{cm}^2$ is not critical values for MAPD, i.e. the device is still functional. The results allow using such diodes for the registration of alpha particles.

INTRODUCTION

In the last several years the advanced progress in the area of MAPD allows using this type of diodes in high energy physics as detectors (in CERN and NICA-MPD) so the investigation of the radiation hardness of MAPD is very important [1-3]. The influence of protons and alpha particles on MAPD has not been investigated clearly yet. This paper is dedicated to the investigation of the influence of protons and alpha particles on MAPD [4-5].

EXPERIMENT

The tested devices named as MAPD-3N1P have $3 \times 3 \text{mm}^2$ active area and $15000 \text{pixels}/\text{mm}^2$ pixel density. The manufacturing technology of MC APD has been described in [1]. A single pixel gain of the MAPD was of order 10^4 .

Proton beam with the energy of 150 MeV at FAZOTRON accelerator installed in the Laboratory of Nuclear Problems of Joint Institute for Nuclear Research has been used for irradiation. The beam has a rectangular shape with an area of 50cm^2 , which is larger than the active area of the holder (the holder area is 25cm^2). The distribution of the beam intensity around the beam center is almost flat; the uniformity of the beam intensity within 25cm^2 region is better than 7%. The proton intensity is $1 \cdot 10^8 \text{p}/\text{cm}^2 \text{sec}$. MAPD has been irradiated at room temperature. Reverse voltage (9V) has been applied to each diode during irradiation. The device has been irradiated up to the dose of $1 \cdot 10^{10} \text{p}/\text{cm}^2$.

Am-241 with the kinetic energy of 5.5 MeV has been used as an alpha source. The alpha source has been located above MAPD and the distance between the alpha source and the diode has been selected as 1 cm. The energy lost of the alpha particles in air is about 700 keV and the rest of the energy of the alpha particles has been deposited in the diode. The range of the alpha particles in silicon is $22 \mu\text{m}$ (for 4.8 MeV). The alpha particle intensity has been measured by the counter and the intensity is $3.1 \cdot 10^3 \alpha/\text{cm}^2 \text{sec}$. MAPD has been irradiated at room temperature. During irradiation reverse voltage (91.7V) has been applied to each diode. The irradiation process consists of 4 steps: $3.3 \cdot 10^7 \alpha/\text{cm}^2$, $3.3 \cdot 10^8 \alpha/\text{cm}^2$, $6.3 \cdot 10^8 \alpha/\text{cm}^2$ and $8.3 \cdot 10^8 \alpha/\text{cm}^2$. The total radiation time is 73.3 hours and the total irradiation dose is $8.3 \cdot 10^8 \alpha/\text{cm}^2$.

MAPD has been illuminated by light emitting diode (LED) with 100 ns long light pulses with 450 nm wavelength and 2.5 kHz frequency. The total dose of the alpha particles has been calculated by KC-014 type counter.

RESULTS AND DISCUSSION

The gain has been determined from the ratio of responsivities with and without gain. The gain has been determined as $M = I_{ph,M} / I_{ph,1}$, where $I_{ph,1}$ - a total average primary photocurrent in diode with $M=1$ ($20 \div 25V$), where $I_{ph,M}$ - a total average photocurrent in diode with gain $M>1$ ($U>30V$).

In Fig.2 the gain dependences with the supplied voltage of diode before and after irradiation are given. In the first step the diode has been irradiated up to the dose of $3.3 \cdot 10^7 \text{ alpha/cm}^2$ then the irradiated diode has been kept for 15 minutes at room temperature and then its I-V characteristic has been measured. The data show that the dark current has increased for 9 times and the gain has decreased for 3 times at 93V voltage. In the second step the diode has been irradiated up to the dose of $3 \cdot 10^8 \text{ alpha/cm}^2$ and the dark current and the gain have been measured according to the rule shown above. The data show that the dark current has increased for 46 times and the gain has decreased for 5.6 times at 93V voltage. In the third and fourth steps the diode has been irradiated up to the dose of $6.3 \cdot 10^8 \text{ alpha/cm}^2$ and $8.3 \cdot 10^8 \text{ alpha/cm}^2$. The data show that the dark current has increased for 89.5 and 108 times and the gain has decreased for 9.4 and 11 times at 93V voltage [4].

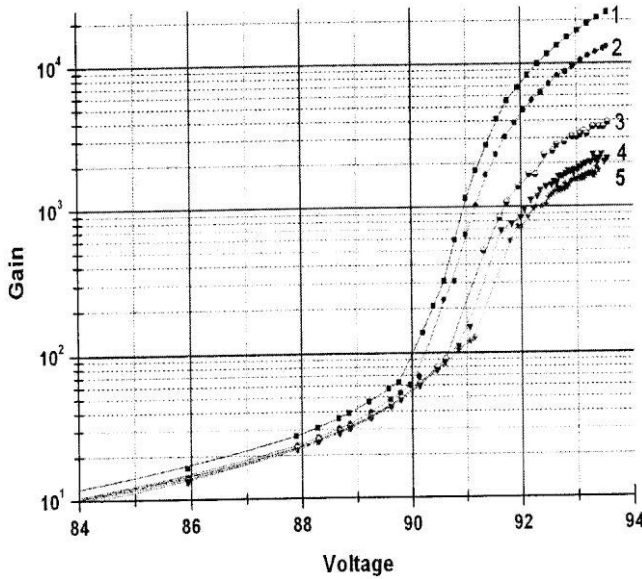


Fig.1.

Gain dependence with the supplied voltage of MAPD diode (at $27C^0$), 1-Before irradiation, 2- $3.3 \cdot 10^7 \text{ alpha/cm}^2$, 3- $3.3 \cdot 10^8 \text{ alpha/cm}^2$, 4- $6.3 \cdot 10^8 \text{ alpha/cm}^2$ and 5- $8.3 \cdot 10^8 \text{ alpha/cm}^2$.

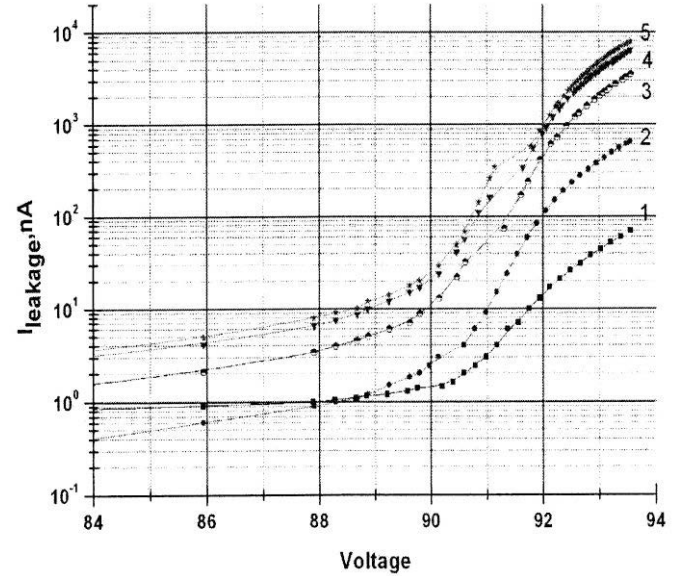
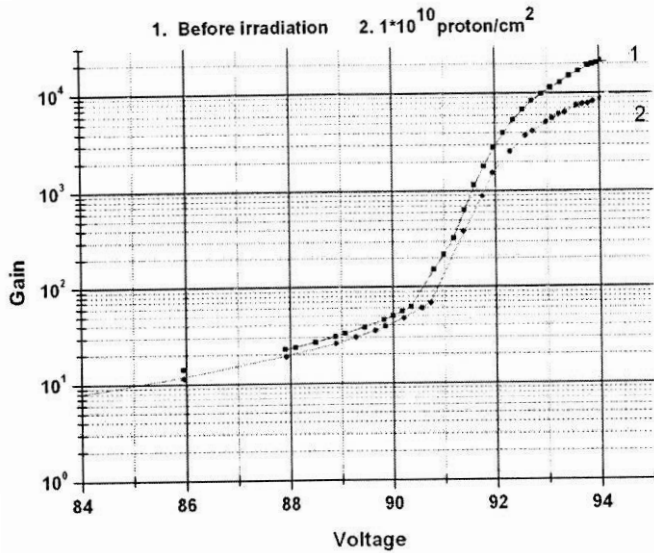


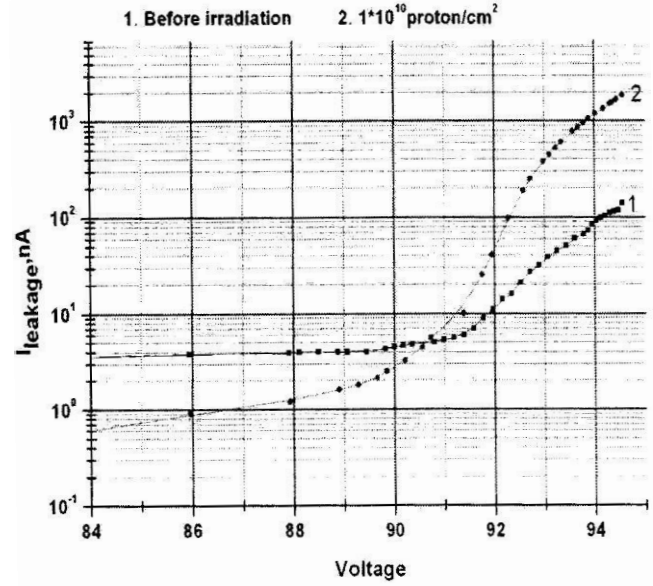
Fig.2.

Current-Voltage (C-V) characteristics of MAPD diode (at $27C^0$), 1-Before irradiation, 2- $3.3 \cdot 10^7 \text{ alpha/cm}^2$, 3- $3.3 \cdot 10^8 \text{ alpha/cm}^2$, 4- $6.3 \cdot 10^8 \text{ alpha/cm}^2$, 5- $8.3 \cdot 10^8 \text{ alpha/cm}^2$.

Fig. 3-4 shows the dependence of the dark current and the gain of the photodiode on bias voltage before and after irradiation. After irradiation the diode has been kept for two days at room temperature and then its current-voltage dependence has been measured at room temperature. The data show that the dark current has increased for an order of magnitude at 93V. At the same time the gain has decreased approximately for 2 times [5].


Fig.3.

Gain dependence with the supplied voltage for MAPD (27C°), 1-before irradiation, 2- $1 \cdot 10^{10}$ proton/cm².


Fig.4.

Current-Voltage (C-V) characteristics of MAPD diode (27C°), 1-before irradiation, 2- $1 \cdot 10^{10}$ proton/cm².

It is known that the full dark current (J_{full}) of MAPD may be expressed as $J_{full} = J_{surf.} + M \cdot J_{gen.}$, where $J_{surf.}$ —surface dark current which have no multiplication, $J_{gen.}$ —dark current generated in photosensitive volume which may have multiplication, M —multiplication factor of avalanche process. Generally, $J_{surf.} \gg J_{gen.}$. An increase of the avalanche dark current at $U > 91V$ is caused by the increase of the dark generation rate due to the creation of new generation centers in the volume of silicon. The decrease of photocurrent is an indication of the decrease of the gain and the photon detection efficiency. The latter occurs due to the decrease of avalanche triggering probability which is in its turn the result of the dark count rate increase which leads to a smaller number of pixels available at the given moment for the avalanche triggering.

The measurements show that the doses of $8.3 \cdot 10^8$ alpha/cm² and $1 \cdot 10^{10}$ p/cm² are not very critical for MAPD. Despite the changes in the dark current and the gain after irradiation the device still can be operated after the irradiation at such dose.

1. Z.Ya.Sadygov, *Russian Patent № 2316848*, priority from 01.06.2006.
2. Y.V. Musienko, D.D.Renker, Z.X.Charifoulline, U.K.Deiters, S.X.Reucroft, J.X.Swain, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A (NIM-A)*, **610** (2009) 87–92.
3. З.Й.Садыгов, А.Г.Ольшевский, Н.В.Анфимов, Ф.И.Ахмедов, В.Н.Жежер, З.В.Крумштейн, Р.Х.Мухтаров, В.В.Чалышев, И.Е.Чириков-Зорин, *Международная Конференция «Инженерия Сцинтилляционных Материалов и Радиационные Технологии»*, Харьков, Украина, (2010) 52.
4. F.I.Ahmadov, N.V.Anfimov, Z.V.Krumshtein, R.S.Madatov, R.N.Mechtiyeva, A.A.Nozdrin, A.Q.Olshevski, V.N.Shvetsov, Z.Y.Sadygov, S.I.Tyutyunnikov, V.N.Zhezher, *International Conference on Perspectives of Peaceful use of Nuclear Energy (ICPPNE)*, Baku, Azerbaijan, 8-10 November, (2010).
5. Z.Y.Sadygov, R.S.Madatov, F.I.Ahmadov, *ICPPNE*, Baku, Azerbaijan, 8-10 November, (2010).

**MIKRO-PIKSELLİ SELVARI FOTODİODLARIN RADİASİYAYA DAVAMLILIĞININ
TƏDQIQI**

F.İ.ƏHMƏDOV, R.S.MƏDƏTOV, Z.İ.SADİQOV, Y.M.MUSTAFAİYEV

Bu iş Mikro-piksellli selvari fotodiodların xarakteristik parametrlərinə alfa zərəciklərin və protonların təsirinin öyrənilməsinə həsr edilmişdir. Tədqiqat nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, alfa və proton selinin uyğun qiymətləri ($6,1 \cdot 10^8$ alfa/sm² və $1,0 \cdot 10^{10}$ proton/sm²), MSFD üçün kritik doza deyil. Şüalanma dozasının sonrakı qiymətlərində, qaranlıq cərəyanın və gücləndirmə əmsalının dəyişməsinə baxmayaraq, diod öz işləmə qabiliyyətini saxlayır. Alınan nəticələr göstərir ki, MSFD alfa zərəciylərini qeyd etmək üçün istifadə edilə bilər.

**ИССЛЕДОВАНИЕ РАДИАЦИОННОЙ СТОЙКОСТИ МИКРО- ПИКСЕЛЬНЫХ
ЛАВИННЫХ ФОТОДИОДОВ (МЛФД)**

Ф.И.АХМЕДОВ, Р.С.МАДАТОВ, З.И.САДИКОВ, Ю.М.МУСТАФАЕВ

Работа посвящена исследованию радиационных повреждений, вызванных потоками альфа-частиц и протонов на микро-пиксельный лавинный фотодиод (МЛФД). Результаты исследования показывают, что поток альфа-частиц $6,1 \cdot 10^8$ альфа/см² и протонов $1,0 \cdot 10^{10}$ протон/см² не являются критической величиной для МЛФД, т.е. прибор все еще остается работоспособным. Результаты позволяют использовать такие диоды для регистрации альфа-частиц.

Редактор: О.Абдинов

UOT 534

TlSe KRİSTALININ QƏFƏS DİNAMİKASI

V.N.CƏFƏROVA¹, H.S.ORUCOV^{1,2}

Azərbaycan MEA-nın Fizika İnstitutu¹

AZ 1143, Bakı şəh., H.Cavid, 33

Azərbaycan Texniki Universiteti²

AZ 1073, Bakı şəh., H.Cavid, 25

Daxil olub: 16.05.2011
Çapa verilib: 12.09.2011

REFERAT

ĞƏ ABƏNİT proqramlar paketi istifadə olunmaqla Funksional Sıxlıq Həyəcanlaşma Nəzəriyyəsi əsasında normanı qoruyan Hartwigsen-Goedecker-Hutter ion psevdopotensialları ilə TlSe zəncirvari kristalının fonon spektri təməl prinsiplərdən hesablanmış və onun fiziki xassələri araşdırılmışdır. Hesablanmış fonon spektri əsasında BZ-nın mərkəzində Raman, infraqırmızı-aktiv və qeyri-aktiv modlar, onların simmetriyaları, optik fonon tezliklərinin uzununa və eninə modlara parçalanmaları və bu parçalanmaların spektrə təsiri tədqiq olunmuşdur. ĞƏ TlSe birləşməsi üçün Born effektiv yük və dielektrik tenzorları, elastiki sabitlər, molyar istilik tutumu, fonon hal sıxlığı təməl prinsiplərdən hesablanmışdır. Hesablanmış elastiki sabitlər istifadə olunmaqla kristalda yayılan akustik dalğaların sürətləri təyin edilmişdir.

Açar sözlər: TlSe, təməl prinsiplər, Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsi, Lokal Sıxlıq Yaxınlaşması, Born effektiv yükü, dielektrik sabiti tenzoru, elastiki sabitlər, fonon hal sıxlığı, istilik tutumu

GİRİŞ

Ğdəkristal quruluşundakı kəskin anizotropluğu ilə seçilən zəncirvari quruluqlı TlSe birləşməsinin fonon spektri və onun əsasında bir sıra fiziki parametrlər təməl prinsiplərdən, yəni atomlararası qarşılıqlı təsirin model təsəvvürlərinə əsaslanmadan Funksional Sıxlıq Nəzəriyyəsinin Lokal Sıxlıq Yaxınlaşması ilə araşdırılmışdır.

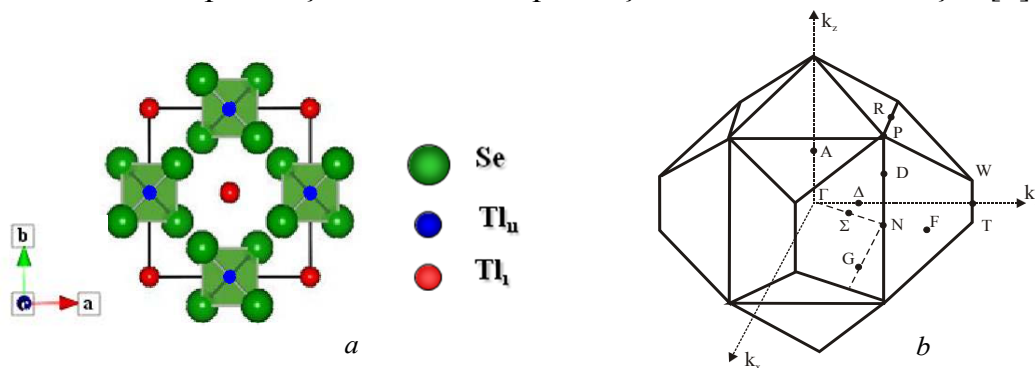
Təqdim olunan iğəqədər TlSe-in fonon spektri model hesablamalarla tədqiqatçılar tərəfindən əvvəllər hesablanmışdır. Həmin iğərdə TlSe-in fonon spektri müəlliflərin qəbul etdiyi atomlararası qarşılıqlı təsir modelinə doqquz ədəd uyğunlaşdırma parametrləri daxil etməklə və Brillouin zonasının (BZ) mərkəzində infraqırmızı əksolmadan (beğ tezlik) və Raman spektrindən (altı tezlik) təyin edilmişdən bir ədəd eksperimental fonon tezliklərinə uyğunlaşdırma proseduru aparmaqla hesablanmış lakin fonon tezliklərindən bəzilərini düzgün identifikasiya etmək mümkün olmamışdır: məsələn, 204sm^{-1} (simmetriyası - $\Gamma_4(B_{2g})$) fonon tezliyinə uyğun model hesablamalardan 72sm^{-1} ; 93sm^{-1} ($\Gamma_4(B_{2g})$) tezliyinə uyğun 25sm^{-1} alınmışdır. Qəbul edilmiş model, həm də BZ-nın mərkəzində infraqırmızı-aktiv fonon tezliklərinin uzununa və eninə modlara parçalanmalarını düzgün hesablamağa, bu parçalanmaların bütövlükdə spektrə təsirini tədqiq etməyə yararlı deyildir.

TlSe-İN KRİSTAL QURULUĞU, TARAQLIĞI HALININ QƏFƏS PARAMETRLƏRİ

TlSe birləşməsinin kristalloqrafik quruluşu ilk dəfə [1] iğində öyrənilmişdir. TlSe kristalı zəncirvari quruluğa malik olub, quruluş tipi B37, qəfəsi həcməmərkəzləşmiş tetraqonal, otaq temperaturunda fəza simmetriya qrupu $D_{4h}^{18}(I4/mcm)$ -dir.

[2] iğində TlSe tipli yarımkəçiricilər üçün ağğıdakı kimyəvi rabitə modeli təklif olunmuşdur Bu quruluğda üçüncü qrup elementləri fərqli kristalloqrafik vəziyyətlərdə durur. TlSe-in kristal quruluşu ion-kovalent rabitə hesabına yaranır. Belə ki, Tl atomlarının yarısı (Tl_I) öz xarici p-elektronunu digər Tl atomlarına (Tl_{II}) verir və bu

zaman Tl_I^{1+} ionuna çevrilir. Tl_{II}^{1-} ionu malik olduğu dörd elektronla sp^3 -konfigurasiya əldə edir və halkogen atomları (Se) ilə tetraedrik rabitə yaratmaq imkanı qazanır. Tetraqonal ox boyunca düzülmüş tetraedr zəncirləri bu qayda ilə əmələ gəlir. Biryüklü Tl_I^{1+} ionları səkkiz ədəd Se atomunun əhatəsində olmaqla kovalent rabitədə iştirak etmir. Beləliklə, tetraqonal özəkdə dörd ədəd $TlISe_2$ molekulu yerləşir. Deməli, $TlSe$ kristalında zəncirlərdə üçvalentli tallium və ikivalentli selen arasında (Tl^{3+} - Se^{2-}) kovalent, birvalentli tallium və onu oktaedrik əhatə edən ikivalentli selen ionları arasında isə (Tl^+ - Se^{2-}) ion rabitəsi mövcuddur. Ağgıda gəkil 1.a və gəkil 1.b-də uyğun olaraq a - b müstəvisində $TlSe$ tip birləşmələrin kristal quruluşu və BZ təsvir edilmişdir [3].



Şəkil 1.

a) $TlSe$ tip birləşmələrin kristal quruluşu;

b) həcməmərkəzləşmiş tetraqonal qəfəs ($c/a < 1$) üçün Brillouin zonası [3].

$TlSe$, onun binar və üçqat analoqlarının elektrik, fotoelektrik, optik və digər xassələrində onların praktiki tətbiqinə geniş imkanlar yaradan bir sıra maraqlı xüsusiyyətlər açaq edilmişdir. Bu birləşmələr texnikada tətbiq olunmaq üçün əlverişli materiallar olmaqla geniş texniki tətbiq imkanlarına malikdirlər [4].

Təməl prinsiplərdən fonon spektrini qurmaq üçün əvvəlcə $TlSe$ birləşməsi üçün tam enerjinin minimuma gətirilməsi ilə tarazlıq halının qəfəs və halkogen parametrləri təyin edilmişdir. Hesablamalar normanı qoruyan Hartwigsen-Goedecker-Hutter [5] ion psevdopotensialları istifadə olunmaqla Funksional Sıxlıq Həyəcənlaşma Nəzəriyyəsinin [6] Lokal Sıxlıq Yaxınlaşmasında [7] ABACF proqramlar paketi [8] ilə yerinə yetirilmişdir. Kristal üçün Kohn-Sham tənliklərinin [7] həllində qoşma gradient minimallaşdırma metodu [9] tətbiq edilmişdir. Dalğa funksiyalarının sıraya ayrılığında enerjiləri 20Ha-ni aşmayan müstəvi dalğalardan istifadə olunmuşdur Korelyasiya effektləri Ceperley-Alder-Perdew-Zunger [10] sxemi üzrə nəzərə alınmışdır. BZ üzrə integrallama Monkhorst-Pack [11] sxemi üzrə $2 \times 2 \times 2$ və $4 \times 4 \times 4$ qridlərlə yerinə yetirilmişdir. Tl üçün psevdopotensialın seçilməsində atomun $5d$ -elektronlarının valent və ya özək hallarına aid edilməsi ilə əlaqədar olaraq iki hala baxılmışdır. Bir halda Tl atomunun $[Xe] + 4f^{14}5d^{10}$ elektron konfigurasiyası özək, $6s^26p^1$ elektronları isə valent elektronları-, digər halda $[Xe] + 4f^{14}$ -konfigurasiyası özək, $5d^{10}6s^26p^1$ elektronları isə valent elektronları hesab edilmişdir. Çünki bu hallar üçün psevdopotensiallar müvafiq olaraq Tl -HGH və Tl -HGH(d) kimi iştirak edilmişdir.

$TlSe$ üçün təməl prinsiplərdən hesablanmış termodinamik tarazlıq halının qəfəs parametrləri a , c və halkogen parametri x Cədvəl 1-də gətirilmişdir. Müqayisə üçün hesablanmış nəticələr, həmçinin eksperimental nəticələr və onların eksperimental qiymətlərdən fərqi faizlərlə yandakı sütunda verilmişdir. Göründüyü kimi, $TlSe$ üçün hesablanmış kristal parametrlərinin qiymətləri eksperimental qiymətlərlə yaxşı uyğunluq təşkil edir. $TlSe$ üçün təməl prinsiplərdən hesablanmış təzazlıq qəfəs və halkogen parametrlərinin qiymətləri əsasında kristal təşkil edən ionlar (Tl^{1+} , Tl^{3+} və Se^{2-}) arasındakı rabitə uzunluqları və digər yaxın məsafələr təyin edilmiş və Cədvəl 2-də gətirilmişdir.

Müqayisə üçün cədvəldə [1] içində eksperimental təyin edilmiş qəfəs və halkogen parametrlərinin qiymətlərinə görə tipik rabitə uzunluqları və digər yaxın atomlararası məsafələr də verilmişdir.

Cədvəl 1.

TlSe üçün hesablanmış qəfəs və halkogen parametrləri.

Parametr	Psp: Tl-HGH, 222, 20Ha		Psp: Tl-HGH(d), 222, 20Ha		Eksp. [1]
a , Å	7.794	2.8 %	7.814	2.6 %	8.02 ± 0.01
c , Å	6.630	5.3 %	6.884	1.7 %	7.00 ± 0.02
x	0.1795	0.3 %	0.186	3.9 %	0.179 ± 0.0009

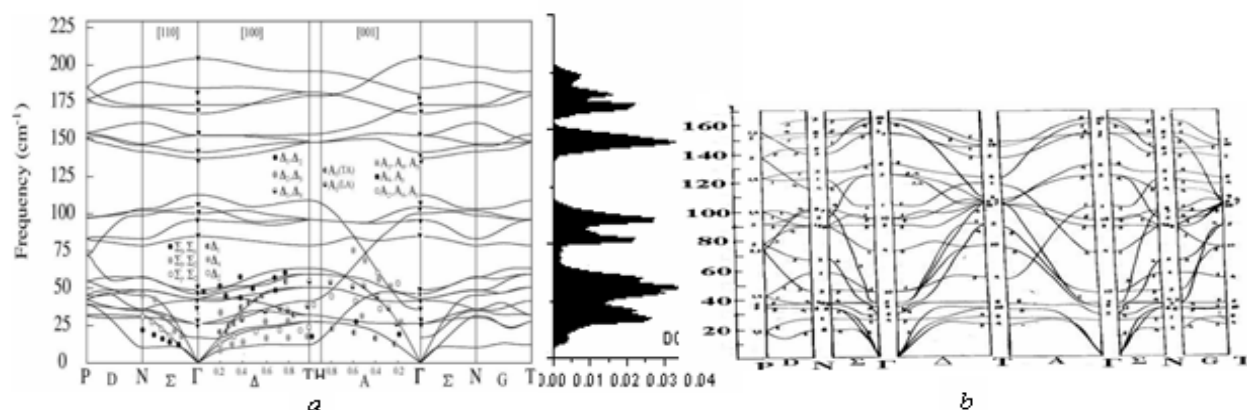
Cədvəl 2.

TlSe kristalını təşkil edən atomlar arasındakı hesablanmış rabitə uzunluqları və digər yaxın məsafələr (MP qrid: $2 \times 2 \times 2$, maksimal kinetik enerji 20Ha).

Məsafələr	Psp: Tl-HGH, Se-HGH	Psp: Tl-HGH(d), Se-HGH	Eksp.[1]
$d(Tl^{3+}-Se^{2-})$	2.585 Å	2.681 Å	2.68 Å
$d(Tl^{I+}-Se^{2-})$	3.307 Å	3.331 Å	3.43 Å
$d(Tl^{3+}-Tl^{3+}) = d(Tl^{I+}-Tl^{I+})$	3.31 Å	3.442 Å	3.5 Å
$d(Se^{2-}-Se^{2-})$	3.657 Å	3.721 Å	3.85 Å
$d(Tl^{3+}-Tl^{I+})$	4.047 Å	3.907 Å	4.01 Å
$d(Se^{2-}-Se^{2-})$	3.897 Å	4.033 Å	4.17 Å

TlSe-İN TƏMƏL PRİNSİPLƏRDƏN HESABLANMIŞ FONON SPEKTRİ

TlSe üçün BZ-nın bütün mühüm simmetriya xətləri üzrə hesablamalardan alınmış (üç ədəd akustik və iyirmi bir ədəd optik budaq olmaqla) dispersiya əyrilərindən ibarət fonon zona quruluşu gəkil 2.a-da verilmişdir. Spekrin sağ tərəfində fonon hal sıxlığı təsvir edilmişdir [12]. *TlSe* üçün qeyri-elastiki neytron [13], infraqırmızı və Raman səpilməsi eksperimentlərindən [14,15] alınmış fonon tezlikləri müqayisə üçün gəkil 2.a-da göstərilmişdir. gəkildə qeyri-elastiki neytron səpilməsindən təyin edilmiş fonon tezlikləri kiçik dairələrlə, infraqırmızı və Raman səpilməsi eksperimentlərindən alınmış tezliklər üçbucaqlar ilə iştirak edilmişdir. *TlSe*-in əvvəllər model təsəvvürlərə əsaslanmaqla hesablanmış fononspektri [16] müqayisə üçün gəkil 2.b-də verilmişdir.



Şəkil 2.

a) *TlSe*-in hesablanmış fonon spektri (bütöv əyri) və fonon hal sıxlığı. Eksperimentlər: qeyri-elastiki neytron səpilməsi [13]-dairələr, Raman səpilmə və infraqırmızı əksolma [14,15]-üçbucaqlar; b) *TlSe*-in model təsəvvürlərdən hesablanmış fonon spektri [16].

Müəyyən edilmişdir ki, *TlSe* üçün qurulmuş fonon spektrində BZ-nın *P* və *R* simmetrik nöqtələrini birləşdirən *K* xətti boyu zonalar zaman inversiyası simmetriyasına görə ikiqat cırlanmışdır (Çəkildə göstərilənməmişdir). BZ üzrə *D* və *A* xətləri boyu bəzi fonon budaqlarında nisbətən güclü dispersiya müşahidə olunur və $110\div 140\text{sm}^{-1}$ tezlik intervalında yasaq aralığı mövcuddur. Bundan əlavə spektrdə akustik və aşağı tezlikli optik budaqlar aşağıölçülü birləşmələr üçün xarakterik olan Çəkildə daha aşağı tezliklərdə yerləşir. *TlSe* üçün BZ-nın mərkəzində təməl prinsiplərdən və əvvəllər model təsəvvürlərdən hesablanmış [16], həmçinin eksperimentlərdə [14,15] əldə edilmiş fonon tezlikləri müqayisə edilərək simmetriyalarına görə qruplaşdırılmış və Cədvəl 3-də verilmişdir.

Cədvəl 3.

TlSe üçün *F* nöqtəsində hesablanmış fonon tezlikləri ilə infraqırmızı (IR) əksolma və Raman (R) səpilməsi eksperimentlərindən [14,15] və model hesablamalardan [16] alınmış qiymətlərin müqayisəsi.

Simmetriya, optik spektrdə fonon aktivliyi	$\omega_{\text{hes.}}(\text{sm}^{-1})$ psp Tl- HGH222-MPgrid, 20.0Ha	Eksperiment		Model hes.
		[14]	[15]	[16]
Γ_5 (E_g) R-aktiv	26.8 (7.5%)	29R	29R	29
	43.3 (12%)	38R	38R	37
	151.8 (7.1%)	141R	135R	125
Γ_9 (A_{2u}) GRaktiv	17.6 (32%)/35.3 (3.8%)	26/33IR	26/34IR	34
	135.8 (0.1%)/177.2 (1%)	136/173IR	134/179IR	160
Γ_{10} (E_u) GRaktiv	42.1 (6.4%)/48.8 (2.4%)	46 /50IR	45/50IR	44
	96.1 (9%)/112.6 (4%)	88/103IR	88 /108IR	95
	166.3 (5%)/183.0 (4.6%)	158/175IR	158/175IR	164
Γ_4 (B_{2g}) R-aktiv	100.3 (7.3%)	93R	93R	25
	203.1 (0.4%)	204R	204R	72
Γ_3 (B_{1g}) R-aktiv	105.1	-	-	154
Γ_1 (A_{1g}) R-aktiv	171.9 (8%)	159R	159R	104
Γ_2 (A_{2g}) qeyri-aktiv	46.7	-	-	90
	85.4	-	-	154
Γ_6 (B_{1u}) qeyri-aktiv	140.4	-	-	133

Hesablanmış fonon tezliklərindən sonra mötərizələrdə tezliklərin uyğun eksperimental qiymətlərdən fərqlərinin nisbi xətalaları verilmişdir. Cədvəldə uzununa və eninə optik modlara parçalanmalardan alınan tezliklərin qiymətləri bir-birindən məli xəttlə ayrılmışdır. Cədvəldən göründüyü kimi, *TlSe* üçün *F* nöqtəsində hesablanmış ən kiçik optik fonon tezliyi 16.8sm^{-1} (LO-TO parçalanmadan alınır) (eksp.: 26sm^{-1}), simmetriyası $\Gamma_9(A_{2u})$, infraqırmızı-aktiv; ən böyük tezlik 203.5sm^{-1} , simmetriyası $\Gamma_4(B_{2g})$, Raman-aktiv olub, simmetriyaca və kəmiyyətə eksperimentlə əla uyğunluq təşkil edir (eksp.: 204sm^{-1}) [14,15]. Fonon tezlikləri üçün infraqırmızı-, Raman səpilməsi

[14,15] və qeyri-elastiki neytron səpilməsindən [13] alınan eksperimental qiymətlərlə iGƏ təməl prinsiplərdən hesablamalardan alınan nəticələr yaxın uyğunluq təşkil edir. [12,13] iGƏrində Γ_3 (B_{1g}) simmetriyalı R-aktiv (hes.: 105.1sm^{-1}), rəqsləri Γ_2 (A_{2g}) və Γ_6 (B_{1u}) təsvirləri ilə çevrilən qeyri-aktiv fonon modları (hes.: 46.7; 85.4; və 140.4sm^{-1}) eksperimentdə müəyyən edilə bilməmişdir.

Sonda *TlSe* birləşməsi üçün model fonon spektri (gəkil 2.b) hesablamalarında nəzərə çarpan bəzi çatıqlıqları qeyd etmək istərdik:

1. [14,15] eksperimental iGƏrində Γ nöqtəsində ən böyük fonon tezliyi uyğun olaraq 204sm^{-1} olduğu halda model hesablamalarda [16] 164sm^{-1} alınmışdır.
2. [16]-da model hesablamaların [14,15] eksperimental iGƏrə uyğunlaşdırma proseduru aparılmaqla yerinə yetirilməsinə baxmayaraq bəzi tezlikləri identifikasiya etmək mümkün olmamışdır: məs., 204sm^{-1} fonon tezliyinə uyğun model hesablamadan 72sm^{-1} (Γ_4 (B_{2g})); 93sm^{-1} -ə uyğun 25sm^{-1} (Γ_4 (B_{2g})) alınmışdır.
3. Model fonon spektrində (gəkil 2.b) *TlSe* birləşməsinin ion komponentlərinin yaratdığı Kulon sahəsinin təsiri ilə fonon tezliklərinin uzununa (LO) və eninə (TO) modlara parçalanmalarının fonon spektrinə təsiri tədqiq edilməmişdir.

BORN EFFEKTİV YÜKLƏRGVƏ DİELEKTRİK SABİT TENZORLARI

TlSe kristalı üçün Born effektiv yükləri və dielektrik sabiti tenzorlarının hesablamaları ABƏNƏ paketinə daxil olan ANADDB proqramı ilə yerinə yetirilmişdir. *TlSe* birləşməsi üçün təməl prinsiplərdən Born effektiv yüklərini hesablamaq üçün aşağıdakı ifadədən istifadə edilmişdir [17]:

$$Z_{i,\alpha,\beta}^* = Z_i + \frac{\Omega_0}{|e|} \frac{(\Delta P_{el})_{\alpha}}{u_{\beta i}}, \quad (1)$$

burada Ω_0 - kristallik bəsit özəyin həcmi, Z_i i -ci atomun ion yükü, $u_{\beta i}$ isə elementar özək R -də i -ci atomun β istiqamətində tarazlıq vəziyyətindən yerdəyişməsidir.

Dielektrik sabiti tenzoru aşağıdakı ifadə ilə hesablanmışdır [17]:

$$\epsilon_{\alpha\beta} = \frac{\partial D_{mac,\alpha}}{\partial E_{mac,\beta}} = \delta_{\alpha\beta} + 4\pi \frac{\partial P_{mac,\alpha}}{\partial E_{mac,\beta}}, \quad (2)$$

burada D_{mac} makroskopik elektrik sahəsinin induksiya vektoru, E_{mac} intensivliyi, P_{mac} deformasiya hesabına əmələ gələn polyarlaşmadır.

Hesablamalarda $6 \times 6 \times 6$ MP q -qrid, müstəvi dalğaların maksimal kinetik enerjisi 60Ha götürülmüşdür. Akustik cəmləmə qaydasının əvvəlki hesablamalarla müqayisədə daha dəqiq ödənilməsi hesablamaların dəqiqliyinin kifayət qədər yüksək olmasını göstərir:

$$\begin{aligned} Z_{xx}^*(\text{Tl}_I) + 2Z_{xx}^*(\text{Tl}_{II}) + 4Z_{xx}^*(\text{Se}) &= 2Z_{yy}^*(\text{Tl}_I) + 2Z_{yy}^*(\text{Tl}_{II}) + 4Z_{yy}^*(\text{Se}) \\ &= 2Z_{zz}^*(\text{Tl}_I) + 2Z_{zz}^*(\text{Tl}_{II}) + 4Z_{zz}^*(\text{Se}) = -0.02. \end{aligned}$$

Hesablamaların nəticələri Cədvəl 4-də gətirilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, *TlSe*-in elementar özəyini təşkil edən iki növ *Tl* atomlarının bir-birindən fərqi bu atomlar üçün zəncirlərə paralel istiqamətdə hesablanmış Born effektiv yükləri arasında təxminən iki dəfə fərqdə özünü göstərir: $Z_{zz}^*(\text{Tl}^{I+}) = 2.41e$ və $Z_{zz}^*(\text{Tl}^{3+}) = 4.06e$. Zəncirlərə perpendikulyar istiqamətdə bu atomların (Tl^{I+} və Tl^{3+}) Born effektiv yükləri arasında əhəmiyyətli fərq yoxdur: $Z_{xx}^*(\text{Tl}^{I+}) = Z_{yy}^*(\text{Tl}^{I+}) = 2.74e$, $Z_{xx}^*(\text{Tl}^{3+}) = Z_{yy}^*(\text{Tl}^{3+}) = 2.45e$. *Tl* atomları üçün Born effektiv yük tenzoru diaqonal şəkildə malikdir. *Se* atomları üçün yalnız $Z_{xy}^*(\text{Se}^{2-}) = Z_{yx}^*(\text{Se}^{2-})$ qeyri-diaqonal element sıfırdan fərqli olub, $(\pm 0.11e)$ diaqonal elementlərin təxminən 4%-ni təşkil edir. [18] iGƏndə *TlSe*-in optik spektrləri əsasında təyin edilmiş dielektrik sabitinin qiymətləri $E \parallel c$ və $E \perp c$ polyarlaşmalarında

$\epsilon_{\infty\parallel}=11.5$ və $\epsilon_{\infty\perp}=10.8$ alınmışdır. [19]-də yüksək fonon tezliyi oblastında, səpilmə spektrindən tapılmış yüksək tezlikli dielektrik sabitləri üçün $\epsilon_{\infty\parallel}=10.1$ və $\epsilon_{\infty\perp}=9$, [20] içində spektro-ellipsometrik optik ölçmələrdən təyin edilmiş dielektrik sabitləri üçün isə $\epsilon_{\infty\parallel}=13.4$ və $\epsilon_{\infty\perp}=12$ alınmışdır. Cədvəl 5-də *TlSe* üçün təməl prinsiplərdən hesablamalardan alınmış dielektrik sabitlərinin qiymətləri ilə əldə edilmiş nəzəri və eksperimental qiymətlər müqayisə edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, tetraqonal koordinat sistemində kristalın dielektrik sabiti tenzoru diaqonal şəkildə malik olub, $\epsilon_{xx}=\epsilon_{yy}=12.8$ və $\epsilon_{zz}=13$, kristalın dielektrik xassələrində ciddi anizotropluğu olmadığını göstərir.

Cədvəl 4.

TlSe üçün Born effektiv yüklərinin hesablanmış qiymətləri
(MP qrid: 6x6x6, maksimal kinetik enerji 60Ha).

Effektiv yüklər									Özək üzrə yüklərin cəmi
$Z^*(Tl_I)$			$Z^*(Tl_{II})$			$Z^*(Se)$			
2.74	0	0	2.45	0	0	-2.60	±0.11	0	-0.02
0	2.74	0	0	2.45	0	±0.11	-2.60	0	-0.02
0	0	2.41	0	0	4.06	0	0	-3.24	-0.02

Cədvəl 5.

TlSe üçün hesablanmış dielektrik sabiti tenzorunun qiymətləri.

Dielektrik sabiti	Hesablama	Optik hesab. [18]	Eksp. [19]	Ellipsometrik eksp. [20]
$\epsilon_{\infty\parallel}$	13	11.5	10.1	13.4
$\epsilon_{\infty\perp}$	12.8	10.8	9	12

FONON HAL SİXLİĞİ (PHONON DOS)

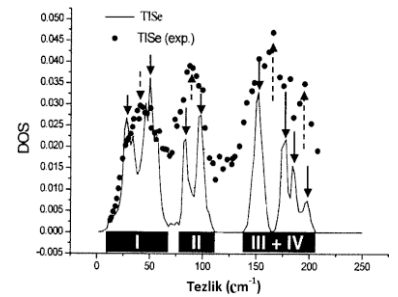
Çox, həmçinin *TlSe*-in BZ-nın ixtiyari q fonon dalğa vektorları üçün olduqca sıx ($32 \times 32 \times 32$) q fonon dalğa vektorları qridi götürməklə fonon hal sıxlığı hesablanmış, yasaq aralıq, qruplar və alt qruplar müəyyən edilmişdir. Fonon hal sıxlığı $g(\omega)$ vahidə normallaşdırılmışdır:

$$\int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 1, \quad (3)$$

burada

$$g(\omega) = \sum_{q,j} \delta(\omega - \omega_j(\vec{q})). \quad (4)$$

TlSe üçün hesablanmış fonon hal sıxlığı şəkil 3-də verilmişdir. Şəkildə kristal üçün hesablamadan (bütöv əyri) və qeyri-elastiki neytron səpilməsi eksperimentlərindən [13] alınmış (dairələr) fonon hal sıxlıqları müqayisə edilmişdir. Sonuncu şəkildə oxlarla yüksək sıxlıqla paylanmış tezliklər (piklər) göstərilmişdir. *TlSe*-in fonon hal sıxlığı mənzərəsini dörd tezlik zonasına ayırmaq olar. Müəyyən edilmişdir ki, birinci zonadakı aşağı tezlikli fononlar Tl^{+I} ionundan və $(Tl^{3+}Se_2^{2-})^{I-}$ zəncir hissəsindən ibarət, ikinci zonadakı orta tezlikli fononlar $Se^{2-}+Tl^{3+}$ və Se^{2-} , yaxın yerləşmiş üçüncü və dördüncü zonalardakı yüksək tezlikli fononlar isə $2Se^{2-}$ və Tl^{3+} ionlarından ibarət dipol cütlərinin rəqslərinə uyğundur.



Şəkil 3.

TlSe-in fonon hal sıxlığı [10]; (bütöv əyri-hesablama; dairələr-qeyri-elastiki neytron səpilməsi eksperimenti [13]).

TlSe ÜÇÜN ELASTİK SABİTLƏR

Təqdim edilən işin əvvəl *TlSe* üçün elastiki sabitlər eksperimental və model təsəvvürlərə əsaslanmaqla təyin edilməmişdir. Ədəbiyyatda bu kəmiyyətlərin təməl prinsiplərdən hesablanmasına rast gəlinmir. [21]-də elastiki sabitlər akustik dalğaların sürətlərinin eksperimentdən tapılmış qiymətləri əsasında, [22] işində *TlSe*-də akustik dalğaların yayılma sürətləri kristalloqrafik ox [001] və [110] istiqamətlərdə impuls metodu ilə təyin olunmuş və alınmış qiymətlərdən istifadə etməklə *TlSe*-in elastiki sabitləri təyin edilməmişdir. [23] işində *TlSe* üçün elastiki sabitlər neytronların qeyri-elastiki səpilməsi eksperimentindən tapılmışdır.

ABƏNİT-də ixtiyari təzyiqdə elastiki sabitlərin hesablanması üçün aşağıdakı ifadədən istifadə olunur [24]:

$$c_{ijkl} = \frac{1}{V_0} \frac{d}{d\eta_{kl}} (V\sigma_{ij}) - \sigma_{ij}^0 \delta_{kl}, \quad (5)$$

burada V_0 -deformasiya edilməmiş, V -deformasiya olunmuş kristalın həcmi, η_{kl} və σ_{ij} kəmiyyətləri uyğun olaraq deformasiya və mexaniki gərginlik tenzorlarının, σ_{ij}^0 elastiki sabitləri hesablayarkən tətbiq olunan gərginlik tenzorunun elementləridir.

Cədvəllərdə elastiki sabitlər üçün Voigt işarələmələrindən istifadə edilməmişdir [23]. Bu işarələmələrə görə (xx)↔1, (yy)↔2, (zz)↔3, (yz)=(zy)↔4, (xy)=(yx)↔6, (xz)=(zx)↔5. Qeyd edək ki, həcməmərkəzləşmiş tetraqonal kristalın simmetriya xassələrindən alınır ki, elastiki sabitlərin komponentləri arasında aşağıdakı münasibətlər mövcuddur: $c_{11}=c_{22}$, $c_{44}=c_{55}$, $c_{12}=c_{21}$, $c_{13}=c_{31}$, $c_{23}=c_{32}$, $c_{44}=c_{55}$. Bu münasibətlər doqquz ədəd sıfırdan fərqli elementdən asılı olmayanların sayını altıya endirir. Beləliklə, həcməmərkəzləşmiş tetraqonal kristal üçün asılı olmayan elastiki sabitlər - c_{11} , c_{12} , c_{13} , c_{33} , c_{44} və c_{66} -dir.

TlSe kristalında elastiki sabitlər üçün Se-HGH, Tl-HGH və Tl-HGH(d) psevdopotensialları ilə “relaksasiya olunmuş” və “bərkidilmiş” ion yaxınlaşmalarında yerinə yetirilmiş hesablamaların nəticələri Cədvəl 6-da və cədvəl 7-də verilmişdir. Cədvəl 6-da müqayisə üçün, həmçinin eksperimentdən [21,22] alınmış elastiki sabitlərin qiymətləri gətirilmişdir. Cədvəl 6-ya diqqətlə baxdıqda elastiki sabitlərin eksperimental qiymətləri arasında böyük xəta ilə alınan qiymətləri görmək olar. Elastiki sabitlərin qiymətlərində doymanın alınmasını təmin etmək məqsədi ilə müstəvi dalğaların maksimal kinetik enerjiləri 20Ha, 40Ha və 60Ha, cəmləmə nöqtələri isə 2x2x2, 4x4x4, 6x6x6 qridləri üzrə götürülməklə hesablamalar aparılmışdır.

Cədvəl 6.

TlSe üçün elastiki sabitlərin “relaksasiya olunmuş” ion yaxınlaşmasında qiymətləri (10GPa).

c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}	c_{66}	
5.0	2.34	2.25	6.81	1.19	1.51	40Ha,444,Se-HGH,Tl-HGH(d)
5.22	2.34	2.35	7.24	1.39	1.52	40Ha,666,Se-HGH,Tl-HGH(d)
5.12	2.27	2.31	7.54	1.25	1.44	60Ha,444,Se-HGH,Tl-HGH(d)
5.33	2.21	2.14	8.33	1.45	1.56	40Ha,444,Se-HGH,Tl-HGH
5.31	2.22	2.15	8.30	1.53	1.58	40Ha,666,Se-HGH,Tl-HGH
5.31	2.21	2.14	8.33	1.45	1.56	60Ha,444,Se-HGH,Tl-HGH
4.2	1.19	-	6.85	1.3	1.6	Eksp.[23, s. 36]
4.5	0.3	1.7	4.2	3.2	1.2	Eksp. [21]
3.9	0.79	3.12	7.28	1.27	1.57	Eksp. [22]

Nəzəri təhlillər nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, elastiki sabitlər üçün 60Ha, 4x4x4 Monkhorst-Pack qridi ilə alınmış nəticələr hesablamalarda istifadə olunan hər iki psevdopotensial (Se-HGH, Tl-HGH və Tl-HGH(d)) üçün ən etibarlı hesab oluna bilər.

Cədvəl 7.

TlSe üçün elastiki sabitlərin “bərkidilmiş” ion yaxınlaşmasında qiymətləri (10GPa).

c_{11}	c_{12}	c_{13}	c_{33}	c_{44}	c_{66}	
6.74	3.88	4.14	8.99	3.62	3.46	40Ha,444,Se-HGH,Tl-HGH(d)
6.95	3.87	4.24	9.45	3.75	3.49	40Ha,666,Se-HGH,Tl-HGH(d)
6.86	3.81	4.20	9.72	3.69	3.38	60Ha,444,Se-HGH,Tl-HGH(d)
7.33	3.94	4.11	10.4	3.91	3.65	40Ha,444, Se-HGH,Tl-HGH
7.31	3.94	4.13	10.4	3.95	3.69	40Ha,666,Se-HGH,Tl-HGH
7.31	3.94	4.11	10.4	3.91	3.65	60Ha,444, Se-HGH,Tl-HGH

TlSe üçün təməl prinsiplərdən hesablamalardan təyin edilmiş elastiki sabitlərin qiymətləri c_{12} istisna olmaqla eksperimental və model hesablamadan alınmış qiymətlər ilə yaxın uyğunluq təşkil edir. c_{12} üçün eksperimentlərdən alınan qiymətər iqtisadlı alınan qiymətlərə nisbətən xeyli kiçik olmaqla bir-birlərindən çox fərqlənirlər: $(2.21 \cdot 10^{10} \text{Pa}$ -hes.; eksp. [21,22,23]: $0.3 \cdot 10^{10} \text{Pa}$; $0.79 \cdot 10^{10} \text{Pa}$; $1.19 \cdot 10^{10} \text{Pa}$).

TlSe KRİSTALINDA YAYILAN AKUSTİK DALĞALARIN SÜRƏTLƏRİ

İqtisadlı TlSe üçün hesablanmış elastiki sabitlərin qiymətləri əsasında bu kristalda yayılan eninə və uzununa akustik dalğaların sürətləri ilk dəfə olaraq təməl prinsiplərdən, təqdim olunan iqtisadlı qədər isə TlSe kristalında yayılan akustik dalğaların sürətləri eksperimental tədqiq edilmişdir. [22] iqtisadlı TlSe kristalında akustik dalğaların yayılma sürətləri kristalloqrafik ox [001] və [110] istiqamətlərində impuls metodu ilə təyin olunmuşdur.

TlSe üçün elastiki sabitlərin yuxarıda hesablanmış qiymətlərindən istifadə etməklə məlum Christoffel tənlikləri:

$$(\Gamma_{ik} - \delta_{ik} \rho v^2) u_k = 0 \quad (6)$$

əsasında bu kristalda [001], [110], [100], [101] və [111] kristalloqrafik ox istiqamətlərdə yayılan akustik dalğaların sürətləri təyin edilmişdir, burada $\Gamma_{ik} = c_{ijkl} n_j n_l$, ρv^2 Γ_{ik} - Christoffel tenzorunun məxsusi qiymətidir.

$$\det|\Gamma_{ik} - \delta_{ik} \rho v^2| = 0 \quad (7)$$

Çırtından məxsusi qiymətlər, (6) tənliklərinin həllindən isə u_k məxsusi vektorları tapılmışdır. Bu məxsusi vektorlar rəqslərin polyarlaşmasını təyin edir. Tetraqonal kristallar üçün Christoffel tenzorunun komponentləri Cədvəl 8-də verilmişdir.

Cədvəl 9-da Tl-HGH və Tl-HGH(d) psevdopotensialları ilə akustik dalğaların sürətlərini hesablayarkən istifadə olunmuş TlSe kvazi-birölçülü birləşməsinin elementar özəyinin həcmi və sıxlığının qiymətləri gətirilmişdir. Tetraqonal kristalın elementar özəyinin həcmi $V = 1/2 a^2 c$ ilə hesablandığından, sıxlıq (ρ) üçün yazmaq olar:

$$\rho = \frac{Z(m_{Tl} + m_{Se})}{1/2 a^2 c}, \quad (8)$$

burada $2 \cdot Z$ -elementar öəkədəki atomların sayı, $m_{Tl} = 33.95 \cdot 10^{-23} q$ və $m_{Se} = 13.12 \cdot 10^{-23} q$ uyğun olaraq Tl və Se atomlarının kütlələri, a və c optimallaşdırılmış qəfəs parametrləridir (Cədvəl 10).

TlSe kristalında kristalloqrafik ox [100] istiqamətində cədvəl 8-ə əsasən (7)-dən alınmış matris diaqonal şəkildə olduğundan onun məxsusi qiymətləri Tl-HGH və Tl-HGH(d) psevdopotensialları ilə müvafiq olaraq {5.31, 1.56, 1.45} və {5.12, 1.44, 1.25} -

dir. Bu qiymətlərə uyğun məxsusi vektorlar hesablanmış və müəyyən edilmişdir ki, kristalda [100] istiqamətində yayılan uzununa və eninə akustik dalğaların sürətləri uyğun olaraq [100], [001], [010] polyarlaqmalarda, Tl-HGH psevdopotensialı ilə $v_i=2380m/san$, $v_{il}=1250m/san$ və $v_{l2}=1290m/san$; Tl-HGH(d) ilə $v_i=2400m/san$, $v_{il}=1190m/san$ və $v_{l2}=1270m/san$ -dir.

Cədvəl 8.

Tetraqonal kristallar üçün Christoffel tenzorunun komponentləri.

Γ_{ik}	İstiqamət	[100]	[010]	[001]	[110]	[101]	[011]	[111]
Γ_{11}	$n_1^2 c_{11} + n_2^2 c_{66} + n_3^2 c_4$	c_{11}	c_{66}	c_{44}	$\frac{1}{2}(c_{11}+c_{66})$	$\frac{1}{2}(c_{11}+c_{44})$	$\frac{1}{2}(c_{66}+c_{44})$	$\frac{1}{3}(c_{11}+c_{44}+c_{66})$
Γ_{22}	$n_1^2 c_{66} + n_2^2 c_{11} + n_3^2 c_4$	c_{66}	c_{11}	c_{44}	$\frac{1}{2}(c_{11}+c_{66})$	$\frac{1}{2}(c_{66}+c_{44})$	$\frac{1}{2}(c_{11}+c_{44})$	$\frac{1}{3}(c_{11}+c_{44}+c_{66})$
Γ_{33}	$n_1^2 c_{44} + n_2^2 c_{44} + n_3^2 c_3$	c_{44}	c_{44}	c_{33}	c_{44}	$\frac{1}{2}(c_{33}+c_{44})$	$\frac{1}{2}(c_{33}+c_{44})$	$\frac{1}{3}(c_{33}+2c_{44})$
Γ_{12}	$n_1 n_2 (c_{12}+c_{66})$	0	0	0	$\frac{1}{2}(c_{12}+c_{66})$	0	0	$\frac{1}{3}(c_{12}+c_{66})$
Γ_{13}	$n_1 n_3 (c_{13}+c_{44})$	0	0	0	0	$\frac{1}{2}(c_{13}+c_{44})$	0	$\frac{1}{3}(c_{13}+c_{44})$
Γ_{23}	$n_2 n_3 (c_{13}+c_{44})$	0	0	0	0	0	$\frac{1}{2}(c_{13}+c_{44})$	$\frac{1}{3}(c_{13}+c_{44})$

Cədvəl 9.

TlSe üçün elementar özəyin həcmi və sıxlığının hesablanmış qiymətləri.

Kəmiyyət	60Ha,444, Tl-HGH	60Ha,444, Tl-HGH(d)
$V, sm^3 (10^{-24})$	201.42	211.46
$\rho, q/sm^3$	9.347	8.904

Cədvəl 10.

TlSe üçün hesablanmış qəfəs və halkogen parametrləri.

Parametr	60Ha,444, Tl-HGH		60Ha,444, Tl-HGH(d)		Eksp.[1]
$a, \text{\AA}$	7.792	2.8%	7.834	2.3 %	8.02
$c, \text{\AA}$	6.636	5.2%	6.892	1.5 %	7.00
x	0.179	-	0.185	3.4%	0.179

[001] kristalloqrafik ox istiqamətində qurulmuş matrisin məxsusi qiymətləri Tl-HGH və Tl-HGH(d) psevdopotensialları ilə müvafiq olaraq {8.33, 1.45, 1.45} və {7.54, 1.25, 1.25}-dir. [001] istiqamətdə [001], [100] polyarlaqmalarda, akustik dalğaların sürətləri üçün Tl-HGH ilə $v_i=2980m/san$, $v_{il}=v_{l2}=1250m/san$; Tl-HGH(d) ilə $v_i=2910$, $v_{il}=v_{l2}=1190m/san$ (eksp. [22]: $v_i=2926 m/san$, $v_{il}=v_{l2}=1234m/san$)-dir.

[110] kristalloqrafik ox istiqamətində yayılan akustik dalğaların sürətləri (7) qəfəsinə və cədvəl 8-ə əsasən uyğun matrisin diaqonallaşdırılması ilə tapılmışdır. Bu matrisinin məxsusi qiymətləri Tl-HGH və Tl-HGH(d) psevdopotensialları ilə elastiki sabitlərin cədvəl 6-da gətirilmiş qiymətlərinə uyğun olaraq {5.32, 1.55, 1.45} və {5.135, 1.425, 1.25}-dir. [110] istiqamətdə uzununa və eninə akustik dalğaların sürətləri [110], [-110], [001] polyarlaqmalarda, Tl-HGH ilə $v_i=2390m/san$, $v_{il}=1290m/san$ və $v_{l2}=1250m/san$; Tl-HGH(d) ilə $v_i=2400m/san$, $v_{il}=1270m/san$ və $v_{l2}=1190m/san$ (eksp. [22]: $v_i=2268m/san$, $v_{l2}=1363m/san$)-dir.

[101] istiqamətində {6.08232, 2.18768, 1.505} və {5.67001, 1.90999, 1.345} məxsusi qiymətləri və məxsusi vektorları təyin edilmişdir. Bu kristalloqrafik ox istiqamətdə [101], [-101], [0-10] polyarlaqmalarda akustik dalğaların sürətləri üçün Tl-HGH ilə $v_i=2550m/san$, $v_{il}=1530m/san$ və $v_{l2}=1270m/san$; Tl-HGH(d) ilə $v_i=2520m/san$, $v_{il}=1470m/san$ və $v_{l2}=1230m/san$ alınmışdır.

Cædvæl 11.

594, 604, 614.

Ğisqamət	v_l (m/san)			v_l (m/san)			
Polyar-laQma	TI-HGH	TI-HGH(d)	eksp. [22]	Polyar-laQma	TI-HGH	TI-HGH(d)	eksp. [22]
[001]	2980 (1.8%)	2910 (0.6%)	2926 ($T=300K$)	[100]	1190 (3.7%)	1250 (1.3%)	1234 ($T=288K$)
[110]	2390 (5.1%)	2400 (5.5%)	2268 ($T=290K$)	[-110] [001]	1250 1290 (5.6%)	1190 1270 (7.3%)	- 1363 ($T=288K$) 1360 ($T=293K$)
[100]	2380	2400	-	[010] [001]	1250 1290	1190 1270	- -
[101]	2550	2520	-	[-101] [0-10]	1530 1270	1470 1230	- -
[111]	2440	2440	-	[11-1] [1-10]	1530 1270	1460 1240	- -

TİSE-İN MOL YARİSTİĞİ GÖRÜNTÜSÜ

$$C(T) = 3nNk \int_0^{\omega_{\max}} \sigma(\omega) \frac{(\hbar\omega/k_B T)^2 e^{\hbar\omega/k_B T}}{d\omega} d\omega \quad (9)$$

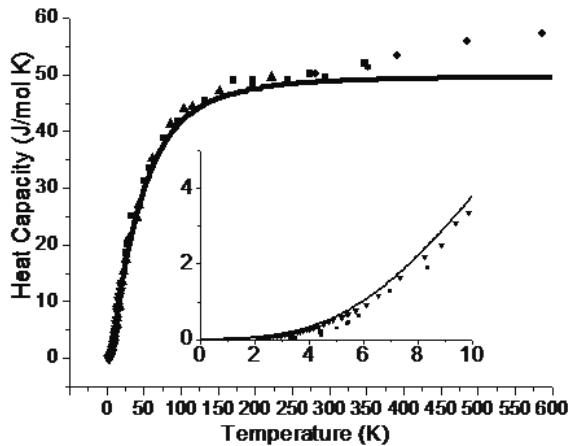
$$C_V(T) = 3nNk_B \int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) \frac{(\hbar\omega/k_B T)^2 e^{\hbar\omega/k_B T}}{(e^{\hbar\omega/k_B T} - 1)^2} d\omega, \quad (9)$$

kalorimetrik metodla [26] əldə edilmiş qiymətlərdir). Şəkil 4-də $0\div 10K$ temperaturlarda alınmış nəticələr ayrıca göstərilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, $TlSe$ -in molyar istilik tutumunun temperatur asılılığında $275K$ -dən yuxarı temperaturlarda anharmoniklik ciddi şəkildə özünü göstərir. Harmoniklik oblastında $TlSe$ -in sabit həcmdə molyar istilik

tutumunun hesablanmış və eksperimentdən tapılmış qiymətlərinin yaxşı uyğunluğu göstərir ki, $TlSe$ birləşməsinin qəfəs dinamikasında əyilmə modları o qədər nəzərəçarpan rol oynamır.

Şəkil 4.

$TlSe$ -in hesablanmış sabit həcmdə molyar istilik tutumu



NƏTİCƏ

$TlSe$ üçün təməl prinsiplərdən hesablanmış fonon spektri Raman-, infraqırmızı-, neytron spektroskopiyasına, termodinamik, akustik, elastiki və dielektrik xassələrə dair məlum eksperimentlərin nəticələrini tamamilə identifikasiya və izah etməyə imkan verir. $TlSe$ -in fonon zona quruluşu $110\div 140\text{sm}^{-1}$ yasaq aralığıyla ayrılmış iki əsas qrupa, hesablanmış fonon hal sıxlığı mənzərəsinə görə qruplardan hər biri öz növbəsində iki altqrupa bölünür. Müəyyən edilmişdir ki, güclü anizotrop $TlSe$ birləşməsinin fonon spektrində və elastiki sabitlərinin qiymətlərində gözlənilməyən əksinə olaraq güclü anizotropluq müşahidə olunmur. $TlSe$ -in $0\div 600K$ temperatur intervalında kvazi-harmonik yaxınlaşmada hesablanmış molyar istilik tutumunun temperatur asılılığında $275K$ -dən yuxarı temperaturlarda anharmoniklik ciddi şəkildə özünü göstərir. $TlSe$ -in elementar özəyini təşkil edən iki növ Tl atomlarının bir-birindən fərqi bu atomlar üçün zəncirlərə paralel istiqamətdə hesablanmış Born effektiv yükləri arasında təxminən iki dəfə fərqdə özünü göstərir. $TlSe$ -in dielektrik tenzoru tetraqonal koordinat sistemində diaqonal şəkildə malik olub, kristalın dielektrik xassələrində ciddi anizotropluğun olmadığını göstərir. Müəyyən edilmişdir ki, $TlSe$ kristalının tetraqonal oxuna perpendikulyar bütün istiqamətlərdə akustik dalğaların yayılma sürətləri təxminən eynidir.

1. J.Ketelaar, W. t'Hart, R.Moore et al., *The crystal structure of $TlSe$, thallos thallic or thallosic selenide*, *Z. Kristallogr.*, **101A** (1939) 396-404.
2. E.Mooser, W.Pearson, *The chemical bond in semiconductors*, *J. Electronics*, **1** (1956) 629-645.
3. Ф.М.Гашимзаде, *Симметрия энергетических зон в кристаллах типа $TlSe$* , *ФТТ*, **2** (1960) 3040-3044.
4. И.В.Алексеев, *Гетеропереход на полупроводниках с цепочечной структурой $TlSe-TlInSe_2$* , *ФТП*, **32** (1998) 588-590.
5. C.Hartwigsen, S.Goedecker, and J.Hutter, *Relativistic separable dual space Gaussian pseudopotentials from H to Rn*, *Phys. Rev. B*, **58** (1998) 3641-3662.
6. P.Hohenberg, W.Kohn, *Inhomogeneous electron gas*, *Phys. Rev.*, **136** (1964) B864-B871.
7. W.Kohn and L.Sham, *Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects*, *Phys. Rev.*, **140** (1965) A1133-A1138.
8. X.Gonze, J.M.Beuken, R.Caracas et al., *First-principles computation of material properties: the ABINIT software project*, *Comp.Mat.Sci.*, **25** (2002) 478-492.

9. M.Payne, M.Teter, D.Allan et al., *Iterative minimization techniques for ab initio total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients*, *Rev. Mod. Phys.*, **64** (1992) 1045-1097.
10. D.Ceperley, B.Alder, *Ground state of the electron gas by a stochastic method*, *Phys. Rev. Lett.*, **45** (1980) 566-569.
11. H.Monkhorst, J.Pack, *Special points for Brillouin-zone integrations*, *Phys. Rev. B.*, **13** (1976) 5188-5192.
12. G.Orudzhev, V.Jafarova, S.Schorr, K.Mimura, K.Wakita, Y.Shim, N.Mamedov, F.Hashimzade, *Phonon spectra of chain TlSe and TlInSe₂: DFT-Based Study*, *Jpn. J. of Appl. Phys.*, **47** (2008) 8193-8199.
13. С.Б.Вахрушев, Б.Е.Квятковский, Н.М.Окунева, К.Р.Аллахвердиев и др., *Неупругое рассеяние нейтронов в TlSe*, *ФТТ*, **26** (1984) 1225-1228.
14. N.M.Gasanly, A.S. Ragimov, *Special features of vibrational properties of mixed crystals with TlSe structure*, *Physica B+C*, **115** (1983) 381-394.
15. K.R.Allakhverdiev, E.A.Vinogradov, N.N.Melnik, M.A.Nizametdinova et al., *Vibrational Properties of TlSe*, *Phys. Stat. Sol.*, **B 87** (1978) K115-K118.
16. М.Г.Шахтактинский, Дж.А.Гусейнов и др., *Динамика решетки и упругие постоянные кристалла селенида таллия*, *ФТП*, **15** (1981) 1522-1524.
17. X.Gonze, C.Lee, *Dynamical matrices, Born effective charges, dielectric permittivity tensors, and interatomic force constants from density-functional perturbation theory*, *Phys. Rev.*, **B 55** (1997) 10355-10368.
18. H.S.Orucov, *Zəncirvari $A^3B^3C_2^6$, layl A^4B^6 aşağıölçülü birləşmələrdə enerji spektrləri, optik sabitlər və kimyəvi rəbitə: Fiz.riy.elm.dok. ... dis.*, (2007) 300s.
19. Л.Л.Януленис, Г.А.Бабонас, М.А.Низаметдинова, Г.С.Оруджев, А.Ю.Шилейка, *Спектры отражения и термоотражения монокристаллов TlSe*, *Литовский Физ. Сб.*, **22** (1982) 63-71.
20. M.Yamazaki, H.Toyota et al., *Dielectric function spectra and intraband density of states in TlSe*, *Jpn. of J. Appl. Phys.*, **39** (2000) 305-306.
21. K.Shin and K.Hashimoto, *Temperature dependence of the reduced Fermi level in TlSe*, *Technol. Reports Kyushi Univ.*, **45** (1972) 820-826.
22. Х.М.Халилов, Ш.О.Оруджева, К.И.Рзаев, *Температурно-частотная зависимость коэффициента поглощения ультразвука и упругих постоянных монокристалла TlSe*, *ФТТ*, **11** (1969) 3043-3049.
23. Р.М.Сардарлы, *Колебательные спектры соединений A^3B^6 и $A^3B^3C_2^6$* , Баку: Изд-во «Элм», (2004) 226.
24. A.R.Oganov, J.P.Brodholt et al., *The elastic constants of MgSiO₃ perovskite at pressures and temperatures of the Earth's mantle*, *Nature*, **411** (2001) 934-937.
25. G.Brekow, M.Meissner et al., *Heat Capacity TlSe from 3 to 600 K*, *J. Phys.C: Solid State Phys.*, **6** (1973) L462-L464.
26. К.К.Мамедов, И.Г.Керимов, В.Н.Кострюков, М.И.Мехтиев, *Теплоемкость селенида галлия и селенида таллия*, *ФТП*, **1** (1967) 441-442.

LATTICE DYNAMICS OF TlSe CRYSTAL

V.N.JAFAROVA, G.S.ORUDZHEV

The work has been dedicated to the *ab initio* calculation of phonon spectrum of TlSe chain crystal using ABINIT program package on the base of Density Functional Perturbation Theory with the Hartwigsen-Goedecker-Hutter norm-conserving ionic pseudopotentials and to the study of physical properties of the crystal. The peculiarities of Raman- and IR-active and non-active modes, their symmetry, and frequencies of longitudinal and transversal optic phonons have been investigated using calculated phonon spectrum for the center of the Brillouin zone. The Born effective charges and dielectric tensor, elastic constants, molar

thermal capacity, density of states have been determined in the chain *TlSe* crystal from *ab initio*. Acoustic wave propagation velocity has been defined using calculated elastic constants.

ДИНАМИКА РЕШЕТКИ КРИСТАЛЛА TlSe

В.Н.ДЖАФАРОВА, Г.С.ОРУДЖЕВ

Работа посвящена расчету из первых принципов фононного спектра цепочечного кристалла *TlSe*, выполненному при помощи пакета программ ABINIT на основе Теории Возмущения Функционала Плотности с применением норм-сохраняющих ионных псевдопотенциалов Hartwigsen-Goedecker-Hutter, и изучению физических свойств указанного кристалла. На основе рассчитанных фононных спектров для центра зоны Бриллюэна установлены особенности Раман- и ИК-активных и неактивных мод, их симметрия, частоты продольных и поперечных оптических фононов. В работе рассчитаны тензор Борновских эффективных зарядов и диэлектрический тензор, упругие константы, молярная теплоемкость, плотность фононных состояний из первых принципов для цепочечного соединения TlSe. С помощью рассчитанных упругих постоянных были определены скорости распространения акустических волн в кристалле.

Редактор: М.Бабаев

UOT 621.315.592

Ge_{1-x}Si_xKRİSTAL TƏBƏQƏLƏRİNİN ELEKTRİK XASSƏLƏRİNİN XÜSUSİYYƏTLƏRİ

**H.MEHDAVI¹, R.S.MƏDƏTOV^{1,2}, Ş.M.ABBASOV¹, Y.M.MUSTAFAİYEV¹,
Ü.F.FƏRƏCOVA²**

*Azərbaycan MEA-nın Radiasiya Problemləri Unstitutu¹
AZ 1145, Bakı şəh., F.Ağayev, 9
Aviasiya Akademiyası²
AZ 1045, Bakı şəh., Binə, 25-km*

Daxil olub: 20.06.2011
Çapa verilib: 09.09.2011

REFERAT

Molekulyar dəstənin epitaksiya üsulu ilə alınmış və T=400÷600K temperaturunda otjiq olunmuş Si/Ge_{1-x}Si_x (x=0; 5 və 15at.%) kristal təbəqələrin elektrofiziki xassələrinin texnoloji parametrlərdən və temperaturdan asılılığı tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, dislokasiyanın sıxlığı $2 \cdot 10^5$ –dən $8 \cdot 10^5 \text{sm}^{-2}$ və kristallaşma temperaturunun artması təbəqənin qalınlığı artdıqca artır və Si atomunun miqdarından asılıdır. Göstərilmişdir ki, Si atomunun miqdarının artması nəticəsində dəşiklərin konsentrasiyasının ($10^{16} \div 10^{15} \text{sm}^{-3}$) və yürüklüyünün azalması ($1320 \div 750 \text{sm}^2/\text{V} \cdot \text{san}$) defektlərin konsentrasiyasının artması ($10^{16} \div 10^{17} \text{sm}^{-3}$) nəticəsində baş verir.

Açar sözlər: Nadir torpaq elementləri, elektrik keçiriciliyi, termoelektrik hərəkət qüvvəsi, Holl əmsalı.

GİRİŞ

Epitaksiya texnologiya üsulu ilə alınmış Ge və Si nazik təbəqələrindən optoelektron qurğularda və mikroelektron sxemlərində geniş istifadə edilir [1,2]. Geniş temperatur intervalında (570÷870K) alınmış nazik təbəqələrin yetişdirilmə mexanizmi, defektlərin təbiəti və elektrofiziki xassələri [3,4] və praktiki tətbiqi haqqında məlumatlar mövcuddur [5]. Alınmış nəticələrə əsasən demək olar ki, Ge və Si həcmi monokristallarında olduğu kimi, nazik kristal təbəqələrdə də yükdaşıyıcıların yürüklüyünün kiçik və termik əmsalının yüksək olması onların müxtəlif tipli diodların, tranzistorların və fotoqəbuledicilərin hazırlanmasında müəyyən məhdudiyyətlər yaradır. Qeyd edilən məhdudiyyətləri aradan qaldırmaq məqsədilə Ge və Si əsasında alınmış bərk məhlullardan, o cümlədən nazik təbəqələrdən istifadə olunması praktiki və elmi cəhətdən maraqlıdır [6,7]. Belə ki, germaniuma müxtəlif faizli (0÷15at.%) silisium atomunun daxil edilməsi, onun parametrlərini məqsədyönlü idarə etməyə və onlar əsasında hazırlanmış cihazların ətalətliyini, temperatur və tezlik diapazonunu idarə etməyə imkan verir [5]. Ancaq nazik təbəqələrin elektrofiziki xassələrinin onların alınma texnologiyasından asılı olduğundan yeni texnoloji üsulların işlənilməsini və parametrlərin dəyişmə qanunauyğunluqlarının müəyyən edilməsi vacibdir. Təqdim edilən işdə molekulyar dəstənin epitaksiyası üsulu (MDE) ilə alınmış müxtəlif komponentli Ge_{1-x}Si_x nazik kristal təbəqələrinin elektrik keçiriciliyinin və Holl sabitinin temperaturdan asılılığının tədqiqi zamanı alınmış nəticələr göstərilmişdir.

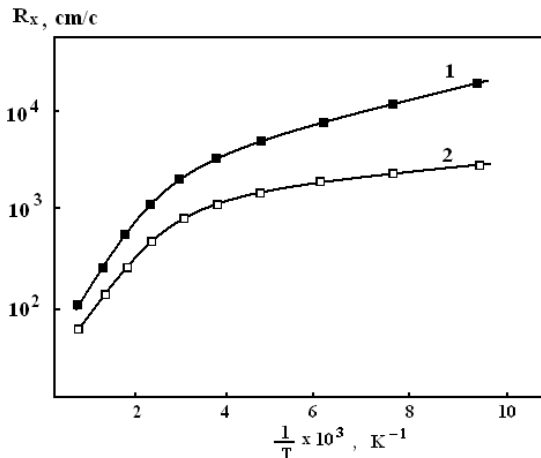
TƏCRÜBƏNİN METODİKASI

Nazik Ge_{1-x}Si_x (x=0; 5 və 15at.%) təbəqələri molekulyar dəstənin altlıq üzərinə kondensasiya üsulu ilə alınmış və p-tip keçiriciliyə malikdir [8]. Təbəqələrin qalınlığa görə bircinsliyi Holl və elektrik keçiriciliyinin tədqiqindən alınan nəticələr əsasında öyrənilmişdir. Epitaksiya zamanı (100) istiqamətli silisium altlığın temperaturu

400÷600K, tədqiqat üçün alınmış nümunələrin qalınlığı isə 50÷150mkm olmuşdur. Alınmış təbəqələrin quruluşu elektronografik, elektron mikroskopiya və rentgenodifraktometrik üsullarla tədqiq edilmişdir. Müəyyən edilmişdir ki, $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ təbəqəsində Si atomunun miqdarının artması ($x=0\div 15\text{at.}\%$) ilə dislokasiyanın sıxlığı $2\cdot 10^5$ –dən $8\cdot 10^5\text{cm}^{-2}$ (deşiklərin kimyəvi aşqarlanması) qədər, kristallaşma temperaturu və dislokasiyanın sıxlığı təbəqənin qalınlığı artdıqca artır. Ölçüləri $15\times 3\times 0,3\text{mm}$ olan nazik kristal təbəqələrdə elektrik keçiriciliyinin və Holl sabitinin temperatur asılılığı işdə [7] göstərilən üsulla tədqiq edilmişdir. ölçmələr 100÷300K temperaturda aparılmışdır.

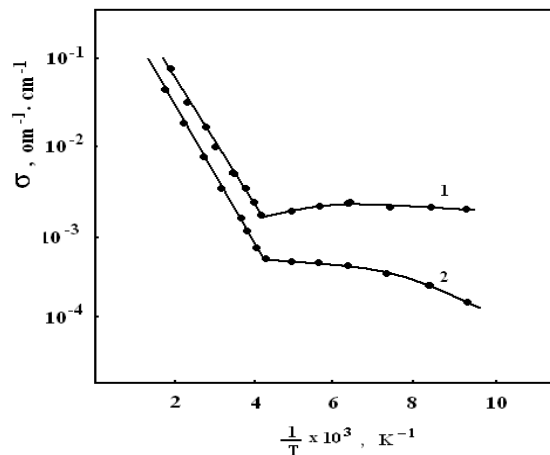
TƏCRÜBİ NƏTİCƏLƏR VƏ ONLARIN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil 1 və 2-də müxtəlif tərkibli $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=5$ və $15\text{at.}\%$) təbəqələrdə Holl sabitinin və elektrik keçiriciliyin temperaturdan asılılığı göstərilmişdir. Şəkil 1-dən göründüyü kimi aşqar oblastdadeşiklərin konsentrasiyası temperaturun azalması ilə dəyişmir. Bu isə həmin oblastda aşqar mərkəzlərinin tam ionlaşmadığını göstərir. Temperaturun artması ilə Holl sabitinin kəskin azalması nəticəsində məxsusi yükdaşıyıcıların konsentrasiyası artır. $R\sim f(1/T)$ asılılığının yüksək temperatur oblastının düzxətli hissəsindən təyin olunmuş ΔE –qadağan olunmuş zonanın eninə uyğun gəlir və $0,76\text{eV}$ təşkil edir ($x=5\text{at.}\%$) və işlərdə [6] göstərilən ədədi qiymətlərlə uzlaşır. $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ təbəqəsində Si atomunun miqdarı artdıqca (Şəkil 1, 2-əyri, $x=5\text{at.}\%$)deşiklərin konsentrasiyası azalır və temperaturdan zəif asılılığı müşahidə olunur. Aşqar oblastda müşahidə edilən əyrinin meylinə əsasən təyin edilmiş aktivləşmə enerjisi $0,15\text{eV}$ olmuşdur və Si atomunun miqdarından asılı olaraq aktivləşmə enerjisinin qiyməti $0,11\div 0,15\text{eV}$ intervalında dəyişir. Qeyd edilən qanunauyğunluq Ge-Si bərk məhlullarının elektrik xassələrinin tədqiqi zamanı da müəyyən edilmişdir [6]. $y\sim f(1/T)$ asılılığından alınmış nəticələr də bunu təsdiq edir (Şəkil 2). Belə ki, şəkil 2-dən görünür ki, 100÷150K temperatur intervalında müşahidə edilən aşqar keçiricilik oblastındadeşiklərin konsentrasiyası dəyişmir.



Şəkil 1.

$\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ təbəqələrində Holl sabitinin temperatur asılılığı: 1- $x=5\text{at.}\%$ Si; 2- $x=15\text{at.}\%$ Si.



Şəkil 2.

$\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ təbəqələrinin elektrik keçiriciliyinin temperaturdan asılılığı: 1- $x=5\text{at.}\%$ Si; 2- $x=15\text{at.}\%$ Si.

Temperaturun 150K–dən yüksək qiymətlərində isə məxsusi yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artması müəyyən edilmişdir. $y\sim f(1/T)$ asılılığının yüksək temperatur oblastından təyin edilmiş səviyyələrin enerjisi $0,75\text{eV}$ ($x=5\text{at.}\%$), aşağı temperatur oblastından isə $0,12\text{eV}$ olmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ təbəqəsində Si atomunun miqdarının artması nəticəsində hər iki səviyyənin aktivləşmə enerjisinin qiyməti artır. Holl sabitinin və elektrik keçiriciliyinin temperatur asılılığından müxtəlif qalınlıqlı $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=5$ və $15\text{at.}\%$, $d=70$ və 150mkm) təbəqələrdə yükdaşıyıcıların

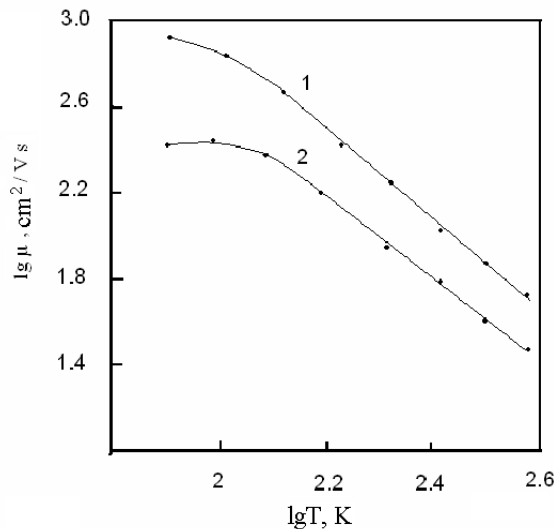
konsentrasiyası, yürüklüyü və akseptor səviyyələrinin aktivləşmə enerjisi təyin edilmiş və cədvəldə göstərilmişdir.

Cədvəl.

Ge _{1-x} Si _x	Δ E, eV	μ, sm ² /V s	p, sm ⁻³	ρ, Om sm
x=5 at. %	0,76	1320	1,2 10 ¹⁶	0,24
x=10 at. %	0,88	830	1,0 10 ¹⁶	0,43
x=15 at. %	0,95	750	7,5 10 ¹⁵	1,00

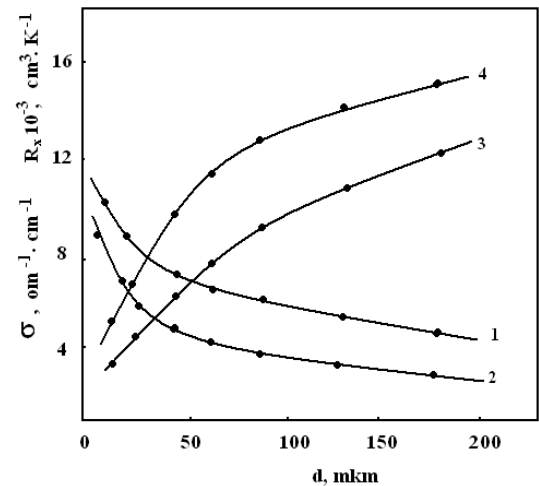
Şəkil 3-də müxtəlif tərkibli Ge_{1-x}Si_x (x=5 və 15at.%) təbəqələrində dəşiklərin yürüklüyünün (omik yürüklük adlanır) temperaturadan asılılığı verilmişdir. Şəkil 3-dən görünür ki, lg μ~f(lgT) asılılığında 150÷400K oblastında dəşiklərin yürüklüyü T^{-1,6} qanunu ilə, 80÷150K oblastında isə μ~T^{-0,5} qanunu dəyişir və işdə [7] həcmi monokristallarda alınan nəticələrlə uzlaşır. Bu isə deməyə imkan verir ki, Ge_{1-x}Si_x kristallik təbəqəsində dəşiklərin yürüklüyü T<150K oblastında kristalın nizamsızlığından, T>150K isə qəfəsin istilik rəqslərindən səpilməsi ilə izah oluna bilər. Alınan nəticələrin təhlili göstərir ki, nazik Ge_{1-x}Si_x təbəqələrdə dəşiklərin yürüklüyü Si atomunun miqdarından asılıdır və Si atomunun miqdarı 0÷15at.% artdıqca yürüklük azalır.

Şəkil 4-də müxtəlif temperaturalarda alınmış təbəqələrin elektrik keçiriciliyinin Ge_{1-x}Si_x (x=5 və 15at.%) təbəqələrinin qalınlığından asılılığı göstərilmişdir. Şəkil 4-dən görünür ki, d<5mkm olduqda μ-nın ədədi qiyməti artır, R—isə azalır. d>70mkm olduqda isə elektrik keçiriciliyinin azalması R və n-artması müəyyən edilmişdir. Eyni texnoloji rejimdə alınmış müxtəlif qalınlıqlı Ge-Si nazik təbəqələrin parametrləri cədvəldə verilmişdir. Alınmış qiymətlərin müqayisəsi göstərir ki, d=5÷50mkm arasında dəyişdiyi zaman μ, R və p-nin qiymətlərinin 3÷7% tərtibində dəyişməsi, onların həcmi xassələrinin eyni və kristalın isə qalınlığa görə bircinsli olmasını deməyə imkan verir. Ge_{1-x}Si_x təbəqələrinin elektrik xassələrinin tədqiqindən alınan nəticələr cədvəldə göstərilmişdir. Cədvəldən görünür ki, epitaksial Ge_{1-x}Si_x təbəqələrinin elektrofiziki xassələrinin Si atomunun miqdarından asılı olaraq dəyişməsi, həcmi kristallarda olduğu kimi [6], onun kristal quruluşu malik olmasını göstərir.



Şəkil 3.

Ge_{1-x}Si_x təbəqələrində deşiklərin yürüklüyünün temperaturadan asılılığı: 1-x=5at.% Si; 2- x=15at.% Si.



Şəkil 4.

Ge_{1-x}Si_x təbəqələrində elektrik keçiriciliyinin (1,2) və Holl sabitinin (3,4) təbəqənin qalınlığından asılılığı: 1,3 - x=5at.% Si; 2,4 - x=15at.% Si.

Alınmış təbəqələrin keçiriciliyi kristal quruluşun yetkinliyindən, qalınlığından və alınma şəraitindən asılıdır. Şəkil 4-dən göründüyü kimi, təbəqənin qalınlığının d>2mkm qiymətlərində elektrik keçiriciliyi praktiki olaraq dəyişmir, d<2mkm şərtində isə

elektrik keçiriciliyi artır. Holl sabiti isə nümunənin qalınlığının azalması ilə eksponensial qanunla azalır və $d < 2 \text{ mkm}$ olduqda Holl sabiti elektrikkeçiricilikdən kiçik, $d > 2 \text{ mkm}$ isə yüksək olur. Müşahidə olunan effekt altlıq- təbəqə arasında keçid oblastının yarana bilməsi ilə bağlı ola bilər. İşlərdə [8] göstərildiyi kimi, altlıq-təbəqə arasında yaranan keçid oblastı təbəqənin quruluşunun qalınlığa görə qeyri-bircinsli olması ilə əlaqədardır və bu səbəbdən onun elektrofiziki xassələri dəyişir. Məhz bu faktı nəzərə alaraq tədqiq olunan nümunələrin qalınlığı $50 \div 150 \text{ mkm}$ tərtibində seçilmişdir. Bu isə, nümunələrin struktur quruluşunun stabilliyinə və defektlərin qalınlığa görə bircins paylanmasına imkan vermişdir.

$\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 5$ və $15 \text{ at.}\%$) təbəqələrində elektrik xassələrinin və Holl sabitinin $80\text{-}400 \text{ K}$ intervalında zamanı müəyyən edilmişdir ki, $T=400 \div 600 \text{ K}$ intervalında alınmış təbəqələrdə aktivləşmə enerjisi $0,11 \div 0,15 \text{ eV}$ və konsentrasiyası $7,5 \cdot 10^{15} \div 1 \cdot 10^{16} \text{ sm}^{-3}$ olan akseptor səviyyəsi müşahidə olunmuşdur. $y \sim f(1/T)$ aşılılığında müşahidə edilən aşqar keçiriciliyin $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ təbəqəsində komponentlərin miqdarından asılı olaraq dəyişməsi isə yükdaşıyıcıların yürüklüyündən asılı olması ilə bağlı ola bilər. Belə ki, işlərdə [9] göstərildiyi kimi, Ge-Si monokristallarda qəfəs rəqslərindən səpilmə zamanı dəşiklərin yürüklüyü Si miqdarı artdıqca azalır. Bu faktın kristal nazik təbəqələr üçün də doğru olduğu Şəkil 4–də öz təsdiqini tapır. Belə ki, $80 \div 150 \text{ K}$ oblastında $\mu \sim T^{-1,6}$, $80 \div 150 \text{ K}$ isə $\mu \sim T^{-0,5}$ qanunu ilə dəyişməsi təcrübi nəticələrin eyni xüsusiyyətlərə malik olduğunu göstərir. Eyni zamanda $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ təbəqəsində Si atomunun miqdarından asılı olaraq dislokasiyanın sıxlığının dəyişməsinin $2 \cdot 10^5$ –dən $8 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-2}$ olduğu müəyyən edilmişdir. Nəzəri və təcrübi işlərdə alınan nəticələrə görə [10] altlıq –yarımkeçirici sərhəddində (Si-Ge, GaAs-Ce və s.) müşahidə edilən quruluş defektləri, keçid oblastları və mexaniki gərginlik qəfəs parametrlərinin uyğunsuzluğundan və texnoloji prosesdən asılıdır. Si- $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 5$ və $15 \text{ at.}\%$) təbəqələrin alınması zamanı qeyd olunan nəticə nəzərə alınmış və müəyyən edilmişdir ki, $0 \div 5 \text{ at.}\%$ təbəqələr üçün dislokasiyanın sıxlığı $\sim (1 \div 2,3) 10^5 \text{ sm}^{-2}$ bərabərdir. Si atomunun miqdarının yüksək qiymətlərində isə ($5 \div 15 \text{ at.}\%$) , eyni texnoloji rejimdə alınan təbəqələrdə, dislokasiyanın sıxlığı $\sim (7 \div 9) 10^5 \text{ sm}^{-2}$ olmuşdur. Bu fərq ,nazik təbəqədə Si atomunun miqdarının artması nəticəsində baş verən nizamsızlıq hesabına ola bilər. $\lg \mu \sim f(\lg T)$ asılılığında (2-əy.) $T < 150 \text{ K}$ müşahidə olunan $\mu \sim T^{-0,5}$ qanunauyğunluğu, məhz $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ təbəqələrində lokal nizamsızlığın Si atomları ilə bağlı olduğunu göstərir.

NƏTİCƏ

Beləliklə, tədqiqat nəticəsində epitaksial üsul ilə alınmış $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ ($x=0; 5$ və $15 \text{ at.}\%$) kristal təbəqələrinin alınması üçün optimal rejim işlənilmiş və müəyyən edilmişdir ki, təbəqə Si atomunun miqdarını dəyişməklə , onun elektrofiziki xassələrini məqsədyönlü idarə etmək olur.

1. Э.А.Клименко, А.Г.Клименко, А.Ф.Кравченко, Б.П.Зотьев, *Особенности электрофизических свойств слоев Ge, полученных на неориентирующих подложках*, Из.Вузов. Сер. «Физика», **5** (1973) 26-31.
2. Э.А.Клименко, А.Г.Клименко, А.В.Ржанов, Р.Ш. Ибрагимов, *Новый способ получения монокристаллических слоев кремния на неориентирующих подложках*, В кн.: *Процессы роста и синтеза полупроводниковых кристаллов и пленок*. Новосибирск, «Наука», Ч.2. (1975) 312-315.
3. Ф.Ф.Сизов, Ю.Н. Козырев, В.П.Кладько, С.В.Пляцко, В.М.Оренко, А.П.Шевляков, *Эпитаксиальные слои и сверхрешетки Si/SiGe, ФТП*, **31** (1997) 922-926.
4. Ш.М.Аббасов, Г.Т.Агавердиева, А.С.Байцар, У.Ф.Фараджова, *Структура и важнейшие электрофизические свойства тонких пленок $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$* , *Электронная обработка материалов*, **2** (2009) 98-104

5. М.Я.Бакиров, Р.С.Мадатов, Ю.М.Мустафаев, *Фотодиоды на основе Ge_{1-x}Si_x, ДАН Азерб. ССР*, **34** №32 (1978) 75-79.
6. В.И.Тагиров, *Полупроводниковые твердые растворы Ge-Si*, Из-во «Елм», (1983) 206.
7. Н.А.Агаев, Г.Х.Аждаров, *Подвижность дырок в кристаллах твердых растворов германий-кремний, Мат. докладов VII коорд. Совещания по исследованию и применению твердых растворов германий-кремний.*, Из-во «Елм», (1989) 56-60.
8. Л.П.Александров, Р.Н.Ловягин, *Эпитаксия тонких пленок германия и кремния из атомных и молекулярных пучков*, М., Электроника, (1974) 34-45.
9. Y.A.Tkhorik, L.S.Khazan, *Plastic deformation and dislocation of heteroepitaxial systems. Kiev, Nauka Dumka*, (1983) 200.
10. И.В.Грехов, Л.С.Костина, Т.С.Аргунова, Е.И.Велякова, А.В.Рожков, *Структурные и электрические свойства подложек SiGe изоляторе, сформированных методом прямого сращивания, ФТП*, **44** (2010) 1135-1140.

FEATURES OF ELECTRIC PROPERTIES OF CRYSTAL LAYERS Ge_{1-x}Si_x

N.MEHDEVI, R.S.MADATOV, Sh.M.ABBASOV, Y.M.MUSTAFAEV, I.F.FARAJOVA

The research results of electrophysical properties of thin-film construction have been given on the basis of Si/ Ge_{1-x}Si_x (x=0; 5 and 15 at %), by the achieved method of molecular beam epitaxy on silicon substrate, depending on the technological parameters and annealing temperature (T=400÷600K).

The density of dislocation has changed from 2·10⁵ to 8·10⁵cm⁻², but the crystallization degree of the films has depended on the thickness and content of Si atoms.

With the increase of Si content, the hole concentration has been (10¹⁶÷10¹⁵cm⁻³), and the mobility has decreased to (1320÷750cm²/V·C), which has been connected with the increase of concentration of defects to (10¹⁶÷10⁷cm⁻³).

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СЛОЕВ Ge_{1-x}Si_x

Н.МЕХДЕВИ, Р.С.МАДАТОВ, Ш.М.АББАСОВ, Ю.М.МУСТАФАЕВ, И.Ф.ФАРАДЖОВА

Представлены результаты исследования электрофизических свойств тонкопленочных структур на основе Si/Ge_{1-x}Si_x (x=0; 5 и 15 ат. %), полученных методом молекулярно-лучевой эпитаксии на кремниевых подложках в зависимости от технологических параметров и температуры отжига (T=400÷600K).

Показано, что плотность дислокаций изменяется от 2·10⁵ до 8·10⁵см⁻², а степень кристаллизации пленок зависит от толщины и содержания атомов Si.

С ростом содержания Si концентрация дырок составляет (10¹⁶÷10¹⁵см⁻³), а подвижность падает (1320÷750см²/V·с), что связано с ростом концентрации дефектов до (10¹⁶÷10⁷см⁻³).

Редактор: А.Гарибов

УДК 678. 077

AB INITIO RASCHET FONONNOGO SPEKTRA ε – GaSe

З.А.ДЖАХАНГИРЛИ^{1,2}

*Институт Физики НАН Азербайджана¹
AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 33
Азербайджанский технический университет²
AZ 1073, Баку, пр. Г.Джавида, 25
cahanzakir@yahoo.com*

поступила 16.05.2011
принята к печати 01.09.2011

Ключевые слова: SEPT, LDA, ABINIT, ε -GaSe,
LO-TO расщепление

РЕФЕРАТ

Из первых принципов на основе теории функционала плотности представлены результаты расчета фононного спектра слоистого полупроводника ε – GaSe.

Определены упругие постоянные и скорости звука вдоль и поперек слоев. Исследование равновесной структуры и фононного спектра поверхности (0001) ε – GaSe показывает, что объемные и поверхностные структурные и динамические свойства этих кристаллов отличаются незначительно. Рассчитанные частоты и симметрии фононных мод в центре зоны Бриллюэна хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными из КР и ИК спектров.

ВВЕДЕНИЕ

Слоистые полупроводники типа A^3B^6 в настоящее время широко применяются в современной квантовой электронике, нелинейной оптике, полупроводниковом приборостроении и оптоэлектронике. В связи с этим в последние годы важное значение приобрели теоретические и экспериментальные исследования колебательных спектров этих полупроводниковых соединений, поскольку они являются источником информации об их структуре, совершенстве, перестройках структуры при фазовых переходах, о характере межатомного взаимодействия.

Получение информации о фононном спектре является исключительно важным и актуальным с точки зрения практических применений низкоразмерных структур в микро- и оптоэлектронных устройствах, поскольку фононы влияют на скорость релаксации возбужденных электронов и на подвижность носителей заряда. Настоящая работа посвящена исследованию из первых принципов фононного спектра слоистого полупроводника ε – GaSe на основе теории функционала плотности, использующие релятивистические аналитические псевдопотенциалы Троиллера-Мартинса [1] в приближении локальной плотности (LDA) с учетом обменно-корреляционных поправок [2].

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И МЕТОД РАСЧЕТА

Полупроводниковые кристаллы GaSe состоят из слабосвязанных слоев [3,4], каждый слой включает в себя четыре плотноупакованные атомные плоскости. Внутри слоя атом металла тетраэдрически окружен тремя атомами халькогена и одним атомом металла и образует с ними химические связи ионно-ковалентного характера. Возможны четыре различных способа упаковки слоев, которым соответствуют четыре политипа β , ε , γ и δ , имеющие пространственные группы

симметрии D_{6h}^4 , D_{3h}^1 , C_{3v}^5 и C_{6v}^4 , соответственно. Различные политипы отличаются между собой количеством слоев в примитивной ячейке и, следовательно, правилами отбора для фононных спектров. Симметрия монослоя D_{3h}^1 одинакова у всех политипов. Основные закономерности фононных спектров этих кристаллов определяются симметрией слоя. Наличие нескольких слоев в примитивной ячейке в β , ε и δ -политипах приводит к появлению межслоевых колебаний и резонансному расщеплению внутрислоевых колебаний. В ε -политипе центр симметрии отсутствует.

Кристаллографические положения восьми атомов в элементарной ячейке следующие

Ga_I в 2(g): $\pm(0,0,z)$

Ga_{II} в Se_I 2(i): $2/3, 1/3, z; 2/3, 1/3, -z$

Se_{II} в 2(h): $1/3, 2/3, z; 1/3, 2/3, -z$

где $z(Ga_I)=0.075$, $z(Ga_{II})=0.575$, $z(Se_I)=0.150$, $z(Se_{II})=0.650$.

В Таблице 1 приведены параметры решетки после оптимизации с помощью 8x8x4 разбиения зоны Бриллюэна (ЗБ) по схеме Монкхорста-Пака [5] вместе с экспериментальными данными. Как видно из Таблицы 1, оптимизированные и экспериментальные [6] значения параметров решетки хорошо согласуются. ЗБ для гексагональной решетки приведена в [7].

Таблица 1.

Оптимизированные и экспериментальные параметры решетки $\varepsilon - GaSe$

Параметры	теория	эксперимент[6]
a(Å)	3.598	3.755
c(Å)	15.561	15.946

Вычисление фононного спектра $\varepsilon - GaSe$ было проведено методом функционала плотности с использованием псевдопотенциального подхода в базе плоских волн. Расчеты осуществлялись с помощью пакета программ ABINIT [8] в приближении линейного отклика и псевдопотенциалами Троиллера-Мартинса, сохраняющие нормы. В разложении волновой функции были учтены плоские волны с энергией до 40Ha, которые обеспечивают хорошую сходимость полной энергии. Интегрирование по ЗБ совершено разбиением 8x8x4 согласно схеме Монкхорста-Пака. Равновесная структура определена минимизацией полной энергии относительно параметров решетки, а внутренние параметры структуры оптимизированы с помощью сил Гельмана-Фейнмана. Процесс минимизации осуществлялся до тех пор, пока модули сил $|\vec{F}| < 2 \frac{mRy}{a.u.}$. Важно упомянуть, что определение точной ионной и решеточной релаксации существенно для корректных вычислений динамики решетки.

Динамика решетки определена по теории DFPT (Density Functional Perturbation Theory) [9-11]. В DFPT статический линейный отклик на фононные искажения определяется исходя из электронных свойств основного состояния. С помощью DFPT динамические матрицы могут быть получены в любой точке ЗБ. Используя элементы симметрии пространственной группы D_{6h}^4 , были вычислены динамические матрицы и фононные частоты в определенных точках (8x8x4 Монкхорст-Пак разбиение) ЗБ. Потом, используя программу ANADDB из пакета программ ABINIT, путем Фурье-преобразования были определены межатомные

силовые постоянные в конфигурационном пространстве. Наконец, произведя обратное Фурье-преобразование, можно найти динамическую матрицу для любого волнового вектора в ЗБ и, следовательно, частоты для всех фононов. Используя $40 \times 40 \times 40$ разбиение ЗБ, определена фононная плотность состояний.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На Рис.1 приведен рассчитанный фононный спектр и фононная плотность состояний для $\varepsilon\text{-GaSe}$. Дисперсия оптических фононов в направлении ГА перпендикулярно к слоям незначительна, что указывает на слабость межслоевого взаимодействия. Характерное попарное расположение фононных состояний параллельно слоям является следствием слоистости кристалла.

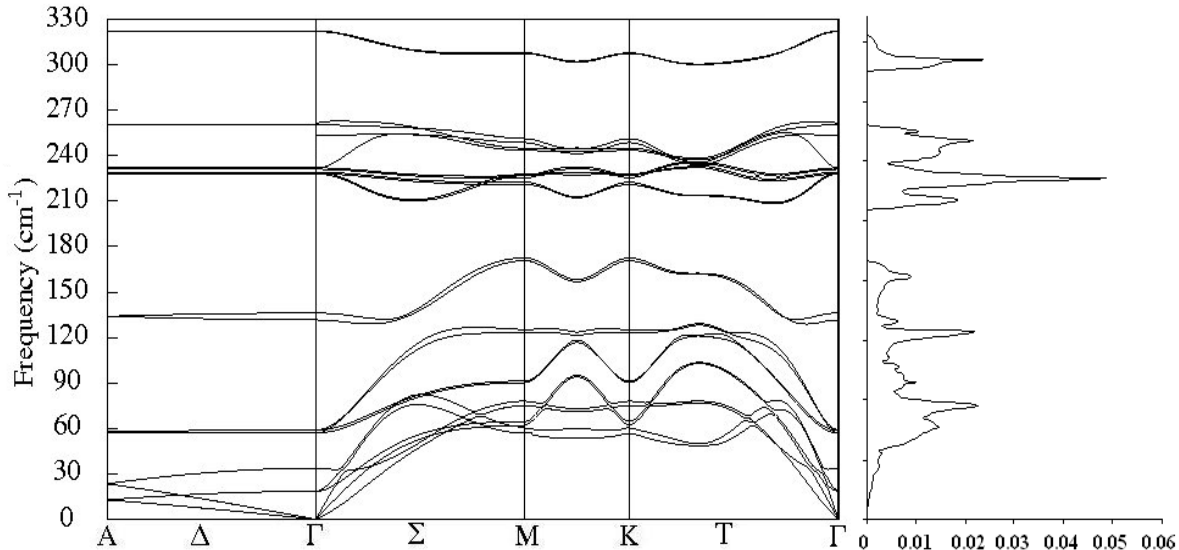


Рис.1.

Дисперсия фононов в $\varepsilon\text{-GaSe}$.

Колебания решетки исследуемых кристаллов распределяются по неприводимым представлениям фактор-группы D_{3h}^1 кристалла в центре ЗБ следующим образом [12]

$$\Gamma = 4A_1' + 4A_2'' + 4E' + 4E''.$$

В $\varepsilon\text{-GaSe}$ политипе шесть ИК-активных колебаний, из которых два образуют давидовские дублеты с акустическими колебаниями, и, следовательно, являются низкочастотными. В спектрах КР активны одиннадцать колебаний, из которых десять образуют давидовские дублеты друг с другом. Кроме того, поскольку в $\varepsilon\text{-GaSe}$ нет центра инверсии, снимается правило альтернативного запрета и в КР могут проявляться ИК-активные моды E' .

На Рис.1 приведены рассчитанный фононный спектр и фононная плотность состояний для $\varepsilon\text{-GaSe}$. Как видно из рисунка, оптические фононы в направлении ГА поперек слоев обладают слабой дисперсией, что указывает на слабость межслоевого взаимодействия. В то же время частоты внутрислоевых колебаний проявляют существенную зависимость от волнового вектора. Из-за того что элементарная ячейка кристалла содержит два слоя и имеет слоистую структуру, фононные состояния параллельно слоям располагаются попарно. Низкочастотные оптические моды соответствуют колебаниям слоев как целое относительно друг друга. Кроме того, как видно из Рис.1, низкочастотные оптические ветви пересекаются с акустической. Этот факт может оказаться важным в процессах, где фонон-фононные взаимодействия играют существенную роль.

Теоретические и экспериментальные [13,14] значения фононных частот по типам симметрии представлены в Таблице 2. Рассчитанные фононные частоты и экспериментальные данные находятся в хорошем согласии, и полученный фононный спектр можно считать достоверным.

Дальнодействующее электрическое поле вызывает расщепление дипольных оптических колебаний на поперечные (ТО) и продольные (ЛО) оптические моды. В наших вычислениях дальнодействующее макроскопическое поле вызывающее ЛО-ТО расщепление учитывается в динамической матрице с помощью Борновского эффективного заряда и высокочастотной диэлектрической постоянной. В $\varepsilon - GaSe$ эти расщепления в точке Γ появляются как разрывы фононных мод, которые хорошо видны на Рис1.

Таблица 2.

Рассчитанные $\omega_{\text{тео}}(\text{см}^{-1})$ и экспериментальные $\omega_{\text{эк}}(\text{см}^{-1})$ частоты ИК- и КР-активных мод $\varepsilon - GaSe$.

симметрия и активность фононов	$\omega_{\text{тео}}(\text{см}^{-1})$	$\omega_{\text{эк}}(\text{см}^{-1})$	
		[13]	[14]
A ₁ ' КР-актив	134.2	135.7	135
	319.2	310.8	308
A ₂ " ИК- актив	32.7	-	37
	229.5		236
	230.4	247	247
E' ИК+КР-актив	17.9	19.8	19.5
	229	215.6	215
	253	254.5	252
E" КР-актив	59.3	60	60
	226	212.3	211

Как известно, скорости звуковых волн, определяемые наклонами акустических ветвей в центре зоны Бриллюэна, зависят от упругих свойств кристалла. Поэтому нами также определены упругие постоянные $\varepsilon - GaSe$. Гексагональные кристаллы имеют пять независимых упругих постоянных: C_{11} , C_{12} , C_{13} , C_{33} и C_{44} . В Таблице 3. приведены рассчитанные и экспериментальные [15-17] значения упругих постоянных.

Таблица 3.

Упругие постоянные $\varepsilon - GaSe$ (в 10^{10} N/m^2).

упругие постоянные	[15]	[16]	[17]	теория
C_{11}	9.4	10.5	10.33	10.74
C_{33}	3.18	3.57	3.41	3.29
C_{44}	1.25	1.05	0.9	0.97
C_{12}	-	2.75	2.89	2.93
C_{13}	-	1.22	1.2	1.09

В связи с экспериментальными трудностями, значения C_{13} , определенные разными авторами, сильно отличаются. Поэтому различие рассчитанного и экспериментального значения для C_{13} может быть вызвано отсутствием точных экспериментальных данных для C_{13} . Фактор анизотропии упругих свойств, определяемый соотношением C_{11}/C_{33} , составляет 3.26. Такая большая продольная анизотропия также свидетельствует о различных величинах сил межатомных взаимодействий внутри слоев и перпендикулярно к нему. Используя полученные упругие постоянные, нами рассчитаны и скорости звука, распространяющиеся вдоль гексагональной оси C в поляризациях L_1 , T_1 и перпендикулярно оси C в

поляризациях L_2, T_2, T_2' (L_i, T_i продольные и поперечные моды, соответственно) по следующим формулам:

$$L_1, T_1: \quad \rho v^2 = C_{33}; \quad \rho v^2 = C_{44},$$

$$L_2, T_2, T_2': \quad \rho v^2 = C_{11}; \quad \rho v^2 = C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2; \quad \rho v^2 = C_{44},$$

где v – скорость звука, $\rho = 5030 \text{ кг/м}^3$ – плотность $\varepsilon - \text{GaSe}$.

Сопоставление рассчитанных и измеренных скоростей звука приведено в Таблице 4. Результаты расчета находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Таблица 4.

Рассчитанные и экспериментальные значения звука (в м/с) $\varepsilon - \text{GaSe}$.

Моды	$v_{\text{тео}}$	[17]
L_1	2557	2604
T_1	1388	-
L_2	4620	4537
T_2	2786	2719
T_2'	1388	-

Для того чтобы оценить влияние поверхности, мы рассчитали также структуру и фононные частоты поверхности (0001) $\varepsilon - \text{GaSe}$ в точках Γ , K и M . Расчет фононов проводился в модели пластинок, содержащей 16 слоев атомов, с использованием периодичность решетки. А в периодической геометрии соответствующие пластинки были разделены вакуумом толщиной $9 \text{ \AA}$. Равновесные положения поверхностных атомов получены минимизацией силы Гельмана-Фейнмана. Анализ рассчитанной равновесной структуры атомов показывает, что структурное изменение незначительно, что и следовало ожидать, так как межслоевое взаимодействие в этих кристаллах слабое и удаление слоя при создании поверхности мало влияет на геометрию атомов ближайшего слоя. Как показывают результаты разница в значении фононных частот в точках Γ , K , M и в эквивалентных точках Γ , K , M в объемном кристалле незначительна и находится в пределах $\Delta\omega < 2 \text{ см}^{-1}$, что еще раз подтверждает слабость межслоевой связи.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей статье на основе теории функционала плотности с помощью функции линейного отклика исследован колебательный спектр, определены скорости звука вдоль и поперек слоям и упругие постоянные $\varepsilon - \text{GaSe}$. Данные расчета и экспериментальных работ хорошо согласуются друг с другом. Результаты исследования атомной структуры и фононного спектра поверхности (0001) показывают, что объемные и поверхностные структурные, а также динамические свойства этих кристаллов имеют схожие характеристики, что характерно для слоистых кристаллов.

1. N.Troullier, L.Martins, *Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations*, *Phys. Rev. B*, **43** (1991) 1993–2006.
2. T.J.Wieting, J.L.Verble, *Interlayer bonding and the lattice vibrations of GaSe*, *Phys.Rev. B*, **5** (1972) 1473-1479.
3. G.Lucazeau, *Vibrational spectra of a GaS single crystal*, *Solid state commun.*, **18** (1976) 917-922.
4. R.Zallen, M.Slade, *Rigid-layer modes in chalcogenide crystals*, *Phys. Rev. B*, **9** (1974) 1627-1637.
5. H.Monkhorst, J.Pack, *Special points for Brillouin zone integrations*, *Phys. Rev. B*, **13** (1976) 5188-5192.

6. A.Kuhn, A.Chevy, R.Chevaller, *Crystal structure and interatomic distances in GaSe*, *Phys. Stat. Sol.(a)*, **31** (1975) 469-475.
7. L.Plucinski, R.L.Johnson, B.J.Kowalski, K.Kopalko, B.A.Orlowski, Z.D.Kovalyuk, G.V.Lashkarev, *Electronic band structure of GaSe (0001): Angle-resolved photoemission and ab initio theory*, *Phys. Rev. B*, **6** (2003) 125304-1 - 125304-8.
8. X.Gonze, J.M.Beuken, R.Caracas, F.Detraux, M.Fuchs, G.M.Rignanese, L.Sindic, M.Verstraete, G.Zerah, F.Jallet, *First-principles computation of material properties: the ABINIT software project*, *Comput. Mater. Sci.*, **25** (2002) 478-487.
9. P.Gianozzi, S.de Gironcoli, P.Pavone, S.Baroni, *Ab initio calculation of photon dispersion in semiconductors*, *Phys. Rev. B*, **43** (1991) 7231-7244.
10. S.Baroni, S.de Gironcoli, A.Dal Corso, P.Gianozzi, *Photons and related properties of extended systems from density functional perturbation theory*, *Rev. Mod. Phys.*, **73** (2001) 515-521.
11. X.Gonze, *Phys.Rev. B, First-principles responses of solids to atomic displacements and homogeneous electric fields: implementation of conjugate-gradient algorithm*, **55** (1997) 10337-10348.
12. S.Jandl, J.L.Brebner, *Group theoretical analysis in lattice vibrations in GaSe polytypes*, *Can. J. Phys.*, **52** (1974) 2454-2458.
13. R.M.Hoff, J.C.Irvin, *Resonant Raman scattering in GaSe*, *Phys.Rev. B*, **10** (1974) 3464-3470.
14. E.Finkman, A.Rizzo, *Lattice vibration and structure of Gas and GaSe*, *Solid state commun.*, **15** (1974) 1841-1845
15. B.M.Powell, S.Jandl, J.L.Brebner, F.Levy, *Anisotropic photon dispersion in GaS*, *J. Phys. C*, **10** (1977) 3039-3044.
16. Ch.Hamaguchi, K.Wasa, M.Yamawaki, *The III Internat. Conf. Phonon Scattering in Condensed Matter, Providence 1979, Ed. H.J. Maris, Plenum Press, (1980) 441.*
17. M.Gatulle, M.Fischer, A.Chevy, *Elastic Constants of the layered compounds GaS, GaSe, InSe and their pressure dependence*, *Phys. Stat., Sol., (b)*, **119** (1983) 327-33.

ε – GaSe KRISTALININ FONON SPEKTRININ ILK PRINSIPLƏRDƏN HESABLANMASI

Z.A.JAHANGIRLI

İlk prinsiplərdən ε – GaSe kristalının fonon spektri hesablanmışdır. Elastiki sabitlər, laylara paralel və perpendikulyar istiqamətdə səsin sürəti təyin olunmuşdur. Hesablama göstərir ki, (0001) səthinin relaksasiya olunmuş atom strukturu və fonon spektri ideal kristaldan cüzi fərqlənir. Brilluen zonasının mərkəzində fononların simmetriyası və tezliyi Raman və İQ eksperimentlərinin nəticəsilə yaxşı uzlaşır.

AB INITIO CALCULATION OF PHONON SPECTRA OF ε – GaSe

Z.A.JAHANGIRLI

The density functional theory based ab initio calculations of the phonon spectra of the layered semiconductor of ε – GaSe have been carried out. Elastic constants and sound velocity along and perpendicular to layers have been determined. Investigation of equilibrium structure and phonon spectra of a surface (0001) of ε – GaSe have been shown, that atomic structural and dynamic properties of these crystals differ insignificantly. The calculated and symmetry of phonons frequencies in the center of Brillouin zone have been in good agreement with experimental data received from Raman and IR spectra.

Редактор: М. Бабаев

UOT 621·315; 548·552; 546·28

QAMMA KVANTLARI İLƏ ŞÜALANDIRILMIŞ $Pb_{1-x}Mn_xTe$ EPİTAKSIAL TƏBƏQƏLƏRİNİN SƏTHİNİN AGM- TƏDQIQI

T.İ.KƏRİMOVA, H.R.NURİYEV*, Ş.M.ABBASOV, M.Ə.RAMAZANOV**

Azərbaycan MEA Radiasiya Problemləri İnstitutu

AZ 1143, Bakı şəh.. F.Agaev, 9

*Azərbaycan MEA Fizika İnstitutu**

AZ 1143, Bakı şəh., H.Cavid pr. 33

*Bakı Dövlət Universiteti***

AZ 1148, Bakı şəh., Z.Xəlilov küç.. 23

kerimova.t@rambler.ru

Daxil olub: 16.05.2011
Çapa verilib: 01.09.2011

Açar sözlər: epitaksial təbəqə, atom – güc mikraskopu (AGM), qamma şüalanma, üç ölçülü (3D), AGM- təsvirləri.

REFERAT

$Pb_{1-x}Mn_xTe$ epitaksial təbəqələrinin qamma şüalanmadan əvvəl və sonra səth morfologiyasının müqayisəli mikroskopik tədqiqatı aparılmışdır. Üçölçülü AGM-təsvirləri və onların histogrammaları əsasında müəyyən edilmişdir ki, manqanın konsentrasiyasını və udulma dozasının qiymətini dəyişməklə müxtəlif defekt hallarına malik səthli təbəqələr almaq olar.

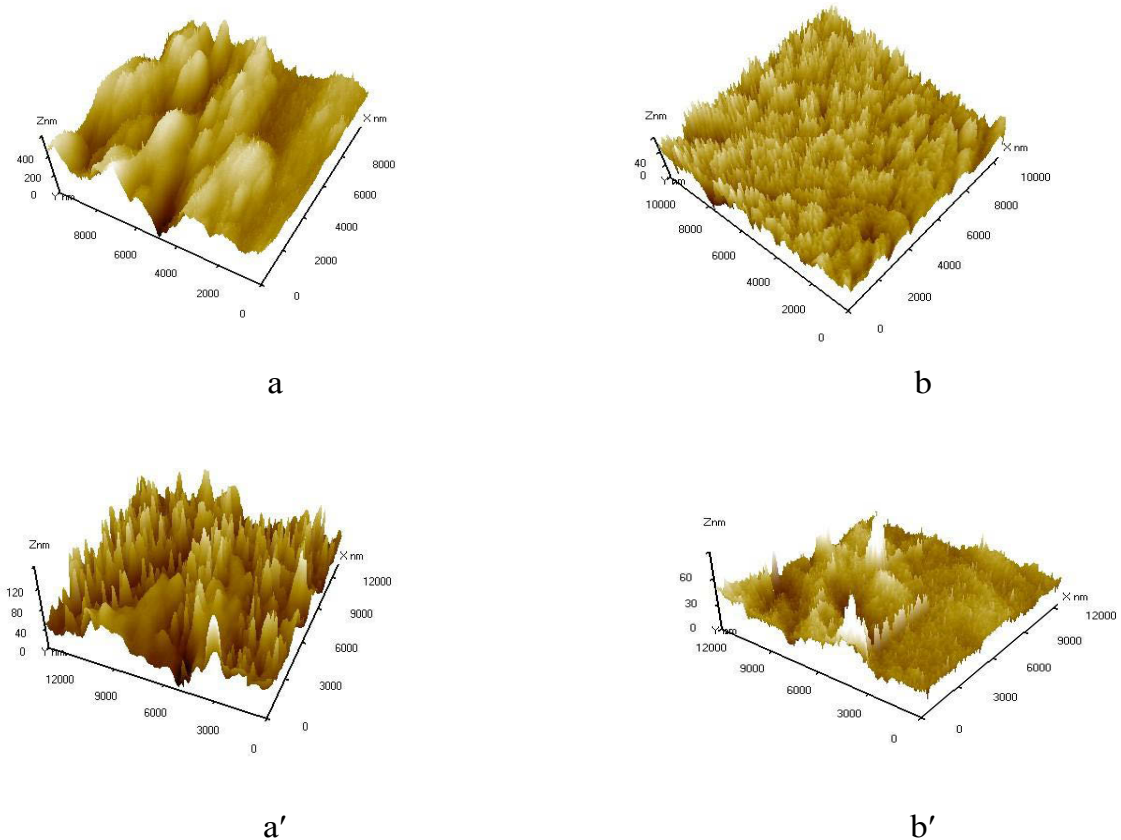
GİRİŞ

$A^{IV}B^{VI}$ tipli qrupa daxil olan $Pb_{1-x}Mn_xTe$ epitaksial təbəqələri çoxözlü qəfəsə malik yarımkeçiricilərdir. Bu nümunələrin tərkibində Mn (manqan) ionlarının olması onlardan maqnitlə idarə olunan yeni yarımmaqnit xassəli diodların hazırlanmasına zəmin yaradır. Qeyd etmək lazımdır ki, çoxözlü qəfəsə malik bu tip materiallarda nizamlı, periodik ,lay –lay yığılmış bir neçə yarımkeçiricinin birgə yaratdığı əlavə potensial hesabına qeyri-adi elektrofiziki və optik xassələr meydana çıxır [1]. Bu xassələr xarici amillərin, o cümlədən, radiasiyanın təsiri altında dəyişə bilər [2]. Nazik epitaksial təbəqələrin fundamental (optik və elektrofiziki) xassələrinin dəyişməsi onların səth halları ilə birbaşa bağlıdır və səthdə baş verən dəyişikliklər ilə tənzimlənirlər. Bu nöqtəyi nəzərdən epitaksial təbəqələrin səthlərində radiasiyanın təsiri ilə baş verən dəyişikliklərin izlənməsi xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Bu ölçmələrin nəticələri radiasiyaya davamlı diodların alınması və onların geniş tətbiq oblaslarının müəyyən edilməsində xüsusi rol oynaya bilər.

Yuxarıda deyilənlərə əsaslanaraq $Pb_{1-x}Mn_xTe$ epitaksial təbəqələrinin səthində, nümunələrin tərkibindəki manqan aşqarının faiz miqdarından və γ - şüalanmanın udulma dozasından asılı olaraq , baş verən dəyişikliklər AGM –metodu ilə öyrənilməsidir.

NÜMUNƏLƏRİN ALINMA VƏ ÖLÇÜLMƏ METODIKASI

Nümunələr, qalınlıqları $2,5 \pm 0,3$ mikm tərtibində molekulyar dəstədən kondensasiya üsulu ilə alınmışdır [3]. Manqan aşqarının nümunədəki kütlə faiz miqdarı 1 və 4 olmuşdur. Nümunələr Co^{60} izotop mənbəli MRX-25 γ -25 qurgusunda $D_\gamma = 10 \div 25$ kGr dozada şüalandırılmışdır. Şüalanma dozasının gücü $dD_\gamma/dt = 0.4$ Qr/s. Nümunələrin səthləri şüalanmadan əvvəl və sonra atom güc mikraskopu (AGM) metodu ilə tədqiq olunmuşdur [4]. Bu məqsədlə səthin üç ölçülü (3d) təsvirləri və səth təsvirlərinin ölçülərə görə paylanma əyriləri- histogrammaları alınmışdır.



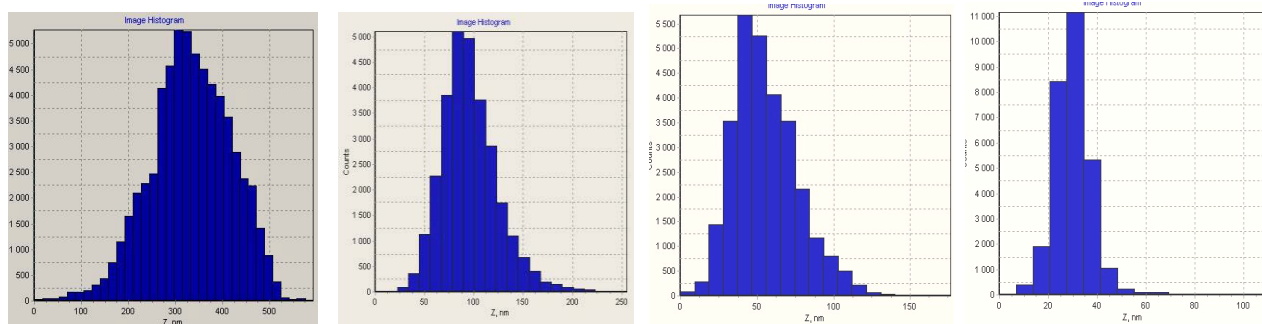
Şəkil:1.

$Pb_{1-x}Mn_xTe$ epitaksial təbəqələrinin üçölçülü (3d) AGM təsvirləri: a - $Pb_{1-x}Mn_xTe$ ($x=0,01$), b - $Pb_{1-x}Mn_xTe$ ($x=0,04$)(şüalanmadan əvvəl), a' - $Pb_{1-x}Mn_xTe$ ($x=0,01$), b' - $Pb_{1-x}Mn_xTe$ ($x=0,04$) (şüalanmadan sonra)

ALINAN NƏTİCƏLƏRİN MÜZAKİRƏSİ

Şəkil-1 AGM vasitəsi ilə alınmış səth təsvirlərinə nəzər salsaq görürük ki, şüalanmadan əvvəl səthin defektlik dərəcəsi(a), şüalanmadan sonrakı (a') səthin defektlik dərəcəsiəndən bir neçə dəfə çoxdur. Bu isə deməyə imkan verir ki, artım γ - şüaların təsiri nəticəsində Mn aşqarının sərbəst atomlarının kristalın səthinə diffuziyasının artmasının nəticəsidir [2]. Həmçinin iki müxtəlif faizli $Pb_{1-x}Mn_xTe$ təbəqələrində aşqarının faizinin artması ilə də, nümunənin şəkil-1 a) və b) səth təsvirlərini müqayisə etsək, görürük ki, Mn aşqarının səth defektlərinin konsentrasiyası artır. Bu da öz növbəsində dediklərimizi təsdiq edir, belə ki, aşqarın faiz miqdarı artdıqda təbəqələrin səthində sərbəst atomların konsentrasiyası da artmış olur və səthin defektlik dərəcəsi də artır. Bu fikirləri 4%-li Mn aşqarlı nümunələrin şüalanmadan əvvəlki və sonrakı səth təsvirlərinin müqayisəsi zamanı da demək olar şəkil-1 b), b').

2-ci şəkildə $Pb_{1-x}Mn_xTe$ yarımkeçiricisinin şüalanmadan əvvəl a), b) və şüalanmadan sonra a'), b') səth elementlərinin ölçülərə görə atomların paylanma histoqramı göstərilmişdir. Göründüyü kimi, şüalanmadan əvvəl səth elementlərinin ölçülərə görə paylanması 60÷100nm arasında olan hissəyə, şüalanmadan sonra isə 20÷40nm arasında olan hissəyə düşür. Bu fərq isə kristalın tərkibində Mn aşqarının artması hesabına baş verə bilər [3].



a

b

a'

b'

Şəkil 2.

$Pb_{1-x}Mn_xTe$ nazik təbəqəsinin AGM-də histoqramması: a - $Pb_{1-x}Mn_xTe$ ($x=0,01$), b - $Pb_{1-x}Mn_xTe$ ($x=0,04$)(şüalanmadan əvvəl), a' - $Pb_{1-x}Mn_xTe$ ($x=0,01$), b' - $Pb_{1-x}Mn_xTe$ ($x=0,04$)(şüalanmadan sonra).

NƏTİCƏ

Aparılmış AGM tədqiqatları nəticəsində belə nəticəyə gəlmək olur ki, Mn aşqarının konsentrasiyasını və γ şüalarının dozasını dəyişməklə tələb olunan monosturuktura malik nümunələr almaq, onların xassələrini idarə etmək və tətbiq oblastını genişləndirmək olar. Bu isə $Pb_{1-x}Mn_xTe$ təbəqələri əsasında radiasiyaya davamlı yüksək həssaslığa malik fotoqəbuledicilərin hazırlanması üçün imkanlar yaradır.

1. Я.И.Нестерец, В.И.Пунегов, К.М.Павлов, Н.Н.Фалеев, *Исследование структурных характеристик полупроводниковой сверхрешетки (JnGa)As/GaAs с использованием высокоразрешающей рентгеновской дифрактометрии, ЖТФ, 69 №2 (1999) 44-53.*
2. П.М.Латвии, И.В.Прокопенко, В.П.Кладько, Л.Л.Федеренко, *АСМ исследования nanoостровков на поверхности полупроводниковых структур, БелСЗМ-5. г. Минск. 7-8 окт., (2002) 28-32.*
3. С.А.Рыков, *Полупроводниковых материалов и наноструктур. БелСЗМ-5 Санкт-Петербург, Наука, (2001) 53.*
4. В.Миронов, *Основы сканирующей зондовой микроскопии, Москва, Техносфера, (2001) 143.*

AFM RESEARCH OF GAMMA-KVHANTS IRRADIATED $Pb_{1-x}Mn_xTe$ EPITAXIAL FILMS SURFACET.İ.KERIMOVA, N.R.NURIYEV, Şh.M.ABBASOV, M.A.RAMAZANOV

The comparative microexamination of surface morphology of sources and gamma-irradiated lead manganese telluride ($Pb_{1-x}Mn_xTe$) epitaxial films has been carried out.

On the basis of there dimensional (3-d) ASM-images and histograms has been determined that, it has been possible to obtain surface layers, with different defective conditions by changing the concentration and absorbed dose of manganese.

АСМ-ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТИ ОБЛУЧЕННЫХ ГАММА-КВАНТАМИ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК $Pb_{1-x}Mn_xTe$ T.И.КЕРИМОВА, Н.Р.НУРИЕВ, Ш.М.АББАСОВ, М.А.РАМАЗАНОВ

Проведено сравнительное микроскопическое исследование морфологии поверхности исходных и гамма-облученных эпитаксиальных пленок теллурида марганца свинца ($Pb_{1-x}Mn_xTe$). На основе трехмерных АГМ-изображений и их гистограмм показано, что варьированием концентрации марганца и поглощенной дозы можно получить пленки с различным поверхностным дефектным состоянием.

Редактор: Дж.Исмаилов

УДК 544.25; 548.74

**ВЛИЯНИЕ СИЛЬНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА
ТОКОПРОХОЖДЕНИЕ В ХАЛЬКОГЕНИДНОМ СТЕКЛООБРАЗНОМ
ПОЛУПРОВОДНИКЕ $\text{Se}_{95}\text{As}_5$, СОДЕРЖАЩЕМ ПРИМЕСИ
РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ АТОМОВ EuF_3**

С.Н.ГАРИБОВА, А.И.ИСАЕВ, С.И.МЕХТИЕВА, В.З.ЗЕЙНАЛОВ

*Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г. Баку, пр. Г.Джавида, 33
sqaribova@rambler.ru*

поступила 25.04.2011
принята к печати 04.07.2011

Ключевые слова: токопрохождение, система $\text{Se}_{95}\text{As}_5$, длина активации, U^- -центры.

REFERAT

Исследованием вольтамперных характеристик (ВАХ) структуры $\text{Al-Se}_{95}\text{As}_5<\text{EuF}_3>\text{-Te}$ установлено, что токопрохождение в нем при приложении к Те положительного потенциала осуществляется по механизму токов монополярной инжекции, ограниченных пространственными зарядами (ТОПЗ), а при обратной полярности наблюдается ВАХ N-типа. Показано, что при напряженностях приложенного электрического поля, превышающего 10^5 В/см , в механизме токопрохождения в исследованных структурах преобладающую роль играют процессы термополевой ионизации нейтральных и отрицательно заряженных U^- -центров, а также процессы рекомбинации электронов и дырок, и захват носителей заряда на U^- -центры. Определены энергетическое положение и концентрация локальных состояний, соответствующих указанным центрам и характеризующее влияние электрического поля - длина активации. Установлено, что примеси EuF_3 , в основном, влияют на концентрацию локальных состояний.

В последнее время сильно возрос интерес к электронным свойствам халькогенидных стеклообразных полупроводников (ХСП). Эти классы полупроводников уникальны тем, что обладают оптической прозрачностью в ближнем и среднем ИК-диапазоне, имеют высокий показатель преломления, низкую энергию фононного взаимодействия, а также способны изменять структуру, край оптического поглощения при освещении светом с энергией фотона в порядке щели подвижности. Кроме этого, при таком освещении появляются регистрируемые электронным спиновым резонансом неспаренные спины, фотолюминесценция стокового сдвига и т.д. Благодаря таким уникальным особенностям электронных свойств ХСП материалы широко используются в качестве активных сред в различных оптоэлектронных устройствах, в частности, в лазерах, оптических усилителях и преобразователях [1-5]. Кроме этого, ХСП считаются перспективными материалами для элементов памяти, запись информации на которых осуществляется за счет фазового перехода стекло-кристалл, происходящего под действием электрического поля. Переход из высокоомного стеклообразного состояния в низкоомное кристаллическое происходит на фоне сильной нелинейности вольтамперной характеристики (ВАХ). Предложены различные модели, описывающие нелинейность ВАХ ХСП материалов [6-11], но отсутствует общепризнанный механизм, объясняющий основные особенности ВАХ указанных материалов в сильном электрическом поле.

Особый интерес представляют ХСП, в состав которых введены ионы редкоземельных элементов (РЗЭ). Это обусловлено с тем что, 4f электронное

состояние в РЗЭ элементах является более устойчивым, и в запрещенной зоне ХСП системы располагаются локальные уровни, обусловленные 4f состояниями ионов РЗЭ. В таком случае оптическая ширина запрещенной зоны ХСП перекрывает по энергии максимально возможное число переходов, разрешенных для ионов РЗЭ, вследствие чего наблюдается широкий спектр фотоиндуцированных явлений при облучении светом с энергией фотона, соответствующего оптической ширине запрещенной зоны. Проведенные исследования показали, что добавление примеси в ХСП, проявляющейся в виде ионов позволяет направленно изменять электронные свойства, в частности, улучшить параметры переноса электрического заряда, повысить фоточувствительность [12-13] и добиться повышения оптической прозрачности материала [14-16]. Это объясняется влиянием указанной примеси на параметры собственных заряженных дефектов (D^- и D^+), т.е. дефектов с отрицательной корреляционной энергией, так называемых U^- -центров [17], контролирующих большинство электронных свойств ХСП. Одним из надежных способов, позволяющих выяснить механизм электронных процессов, ответственных за вышеперечисленные особенности, является исследование влияния сильного электрического поля на перенос электрического заряда, которому посвящена настоящая работа.

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 до 10^{-6} мм. рт.ст. кварцевых ампулах при температуре выше $900^{\circ}C$ во вращающейся печи с последующим охлаждением в режиме выключенной печи. Примесь вводилась в процессе синтеза, концентрация ее лежала в пределах $0,005 \div 1$ ат%.

Вольтамперные характеристики (ВАХ) измерены в стационарном режиме по стандартной методике. Образцы представляли собой «сендвич» с алюминиевыми и теллурическими электродами и изготавливались методом термического испарения в вакууме $\sim 10^{-6}$ мм. рт.ст. Толщина пленок измерялась интерферометрическим методом и варьировалась в диапазоне $1 \div 10$ мкм. ВАХ структуры $Al-Se_{95}As_5<EuF_3>-Te$ исследовались при приложении электрического напряжения обеих полярностей. Режим ТОПЗ наблюдается при приложении к Те положительного потенциала, а при обратной полярности наблюдается ВАХ N-типа.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На Рис. 1 показана ВАХ структуры $Al-Se_{95}As_5<(EuF_3)_x>-Te$ ($x=0.005; 0.5$) при приложении к Те положительного (Рис.1, а), и отрицательного (Рис.1, б) потенциалов при комнатной температуре (такие же ВАХ наблюдаются для других концентраций примеси EuF_3). Наблюдаемые особенности ВАХ исследуемых структур при приложении к теллурическим электродам положительного потенциала (Рис.1, а) свидетельствует о том, что перенос носителей заряда (дырок) в указанном направлении осуществляется по механизму токов монополярной инжекции, ограниченных пространственными зарядами, при участии ловушек захвата носителей заряда [18]. Исследование показало, что напряжение, при котором начинается сверхлинейная зависимость силы тока от напряжения, квадратично зависит от толщины образца, что еще раз доказывает осуществление механизма ТОПЗ. ВАХ структуры $Al-Se_{95}As_5<EuF_3>-Te$ при приложении положительного потенциала к Те отличается тем, что после участка, подчиняющегося омическому закону, не наблюдается $I \sim V^2$, которая имеет место при участии мелких ловушек, а наблюдается участок, соответствующий степенному закону, т.е. $I \sim V^n$, где n

превышает 2. Далее наблюдается участок, где $I \sim V^2$. Наконец квадратичный участок сменяется участком, в котором наблюдается область более сильного возрастания тока. Здесь возрастание тока с напряжением описывается зависимостью близкой к экспоненциальной, что обычно связывается с ионизацией локальных центров [19].

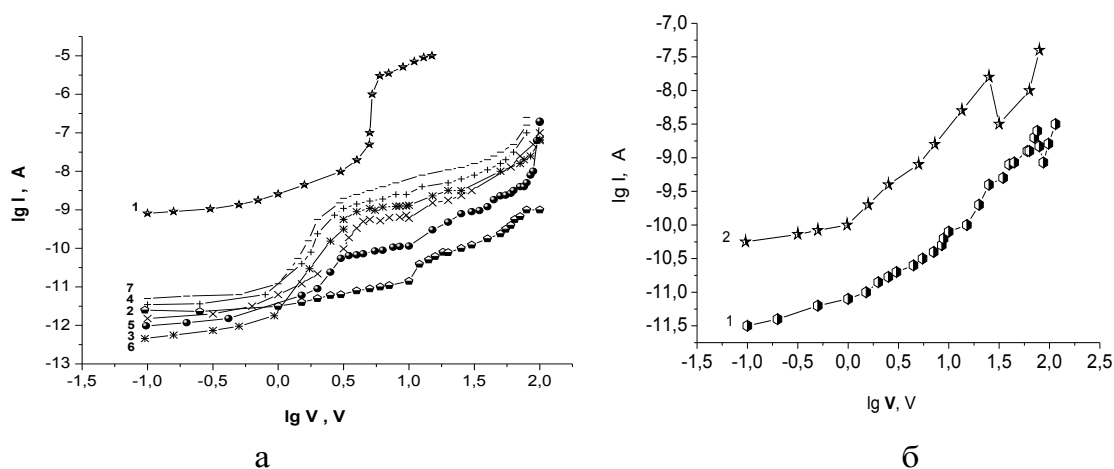


Рис.1.

ВАХ структуры $\text{Al-Se}_{95}\text{As}_5\langle\text{EuF}_3\rangle\text{-Te}$ при приложении к Те положительного (а) и отрицательного (б) потенциалов при комнатной температуре: 1- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.005}$, 2- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.5}$.

Особенности ВАХ исследованных нами структур $\text{Al-Se}_{95}\text{As}_5\langle\text{EuF}_3\rangle\text{-Te}$ свидетельствуют о том, что в указанном материале перенос электрического заряда контролируется несколькими группами ловушечных центров захвата, расположенных по разные стороны от уровня Ферми. Из Рис.1, б видно, что при обратном направлении (при отрицательном потенциале у теллурического электрода) с ростом значения приложенного напряжения линейная зависимость заменяется нелинейным законом и, наконец, при напряженности электрического поля, превышающего 10^5 В/см наблюдается N-образная ВАХ. Такое поведение ВАХ свидетельствует об отсутствии токов монополярной инжекции в исследуемых структурах при приложении к теллурическим электродам отрицательного потенциала. Линейность ВАХ исследованных структур, представленная на Рис.2, как зависимости логарифма силы тока от величины напряжения (т.е. экспоненциальная зависимость тока от напряжения) свидетельствует об ионизации или делокализации локальных состояний под действием электрического поля. Об этом также сообщалось авторами работ [9-11]. В работе [10] нелинейность ВАХ ХСП в сильном электрическом поле связывалась с многофононной туннельной ионизацией U^- -центров [20-21]. Суть данной модели заключается в том, что на первом этапе процесса происходит тепловое возбуждение электрона до некоторого уровня энергии, затем возбужденные электроны туннелируют через потенциальный барьер, создаваемый электрическим полем D^0 -центра при ионизации D^0 -центра, или же короткодействующим полем нейтрального D^0 -центра при ионизации D^- -центра. Принимая энергетическое расположение D^0 -центра, соответствующим глубине 0,6Эв от края валентной зоны, авторами работы [10] рассчитана вероятность термоионизации в зависимости от приложенного электрического поля и установлено, что максимальная вероятность данного процесса должна иметь место при напряженности, превышающей 10^5 В/см . В наших экспериментах N-образный участок ВАХ (Рис.1, б) наблюдается при таких же значениях напряженности приложенного электрического поля, что еще раз свидетельствует о преобладающей роли ионизации локальных центров в механизме токопрохождения в исследованных структурах. Согласно [10], в

сильном электрическом поле происходит ионизация нейтральных и отрицательно заряженных U^- -центров, а также процессы захвата электронов на ионизованные центры:

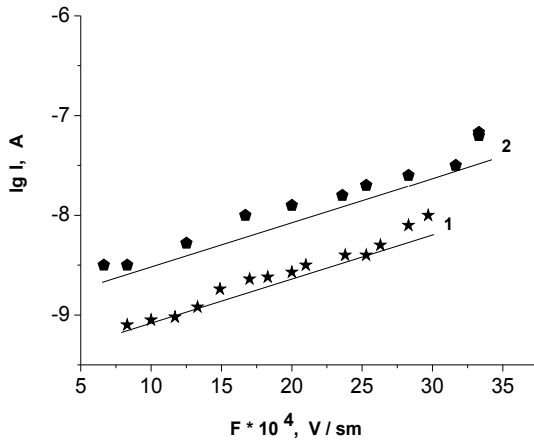
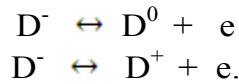


Рис.2.

Зависимости логарифма силы тока от напряженности приложенного электрического поля: 1- $Se_{95}As_5(EuF_3)_{0.005}$, 2- $Se_{95}As_5(EuF_3)_{0.5}$.

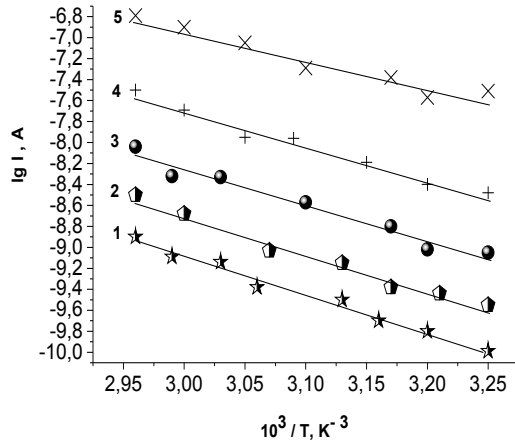


Рис.3.

Температурная зависимость силы тока при различных значениях приложенного электрического поля для структуры $Al-Se_{95}As_5<(EuF_3)_{0.5}>-Te$: 1-10V, 2-18V, 3-32V, 4-56V, 5-100V.

Уменьшение силы тока, по-видимому, связано с тем, что после достижения определенной концентрации свободных носителей заряда происходит их лавинообразный захват U^- -центрами, или же рекомбинация электронов и дырок. Не проявление N-образного участка в ВАХ при приложении положительного потенциала к теллурическому электроду объясняется тем, что сильная инжекция носителей заряда через контакты превалирует над процессами захвата и рекомбинации. На Рис.3 показана температурная зависимость силы тока при различных значениях приложенного электрического поля для структуры $Al-Se_{95}As_5<(EuF_3)_{0.5}>-Te$. Аналогичная зависимость была наблюдаена для $Se_{95}As_5$, содержащего разные концентрации EuF_3 . На Рис.4 показана зависимость энергии активации проводимости от напряженности приложенного электрического поля для ХСП материала $Se_{95}As_5$, содержащего разные концентрации EuF_3 . Наблюдаемые особенности ВАХ в области сильных полей (величина напряженности поля превышает 10^5 В/см) позволяют нам для интерпретации полученных результатов привлечь механизм, предложенный авторами работы [9], согласно которому величина силы тока определяется выражением

$$I = AV \exp\left(-\frac{Ea}{kT}\right), \quad (1)$$

где Ea - энергия активации, k – постоянная Больцмана, T – температура, V – напряжение, приложенное к образцу, A – величина с размерностью проводимости, характерная для данного образца.

Согласно [9] $A = Gq\mu_p V N_e$, (2)

где $G = S/d$ коэффициент, характеризующий геометрию образца, μ_p – подвижность дырок, N_e – концентрация эмиссионных центров, q – заряд электрона.

Как видно из Рис.4, энергия активации электропроводности уменьшается с ростом напряженности электрического поля по закону

$$Ea = B - qLF, \quad (3)$$

где B - характеризует высоту эмиссионного барьера и соответствует половине ширины запрещенной зоны, F - напряженность электрического поля, L - активационная длина в соответствии с [9].

Используя уравнения (1), (2), (3) и учитывая $\mu_p = 10^{-4} \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{сек}$ [14], из кривых Рис.2 и Рис. 4 определены параметры B , N_e и L , результаты которых представлены в Таблице. Как видно из Таблицы, малые концентрации примеси EuF_3 уменьшают концентрацию эмиссионных центров, а большие увеличивают, но при этом значение L не изменяется. Предполагается, что в качестве эмиссионных выступают центры с отрицательной корреляционной энергией с уровнями энергии, расположенными вблизи середины запрещенной зоны, что позволяет нам для интерпретации полученных результатов привлечь представление, развитое в рамках модели заряженных собственных дефектов [17].

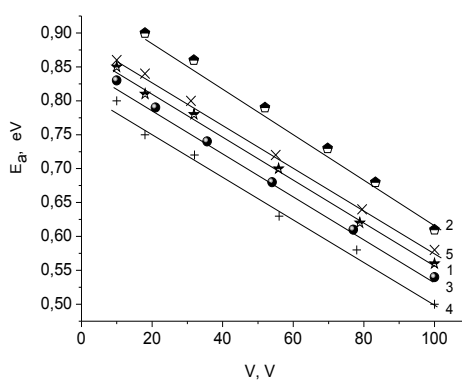


Рис.4.

Зависимость энергии активации проводимости от напряженности приложенного электрического поля для структур: 1-Al- $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ -Te, 2-Al- $\text{Se}_{95}\text{As}_5<(\text{EuF}_3)_{0.01}>$ -Te, 3-Al- $\text{Se}_{95}\text{As}_5<(\text{EuF}_3)_{0.005}>$ -Te, 4-Al- $\text{Se}_{95}\text{As}_5<(\text{EuF}_3)_{0.5}>$ -Te, 5-Al- $\text{Se}_{95}\text{As}_5<(\text{EuF}_3)_1>$ -Te.

Таблица.

	$N_e, \text{ см}^{-3}$	$B, \text{ eV}$	$L, \text{ nm}$
$\text{Se}_{95}\text{As}_5$	$2 \cdot 10^{19}$	0.87	21
$\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.005}$	$9.4 \cdot 10^{18}$	0.86	22
$\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.01}$	$9.3 \cdot 10^{18}$	1.00	21
$\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.1}$	$1.5 \cdot 10^{18}$	0.85	21
$\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.5}$	$3.1 \cdot 10^{18}$	0.81	23
$\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_1$	$1.25 \cdot 10^{19}$	0.89	20

Согласно этой модели, перенос носителей заряда в ХСП контролируется U^- -центрами, представляющими собой заряженные дефекты D^+ и D^- , которые образуются из исходных нейтральных дефектов D^0 согласно реакции



где D^+ и D^- -центры, являющиеся ловушками для электронов и дырок. Предполагается, что роль D^- -центров в нашем случае играют центры S_1^- и P_2^- , связанные с оборванными связями селена и атомами мышьяка с нарушенной координацией, соответственно, а роль D^+ -центров играют трехкоординированные атомы мышьяка и селена.

При введении в ХСП положительно заряженной примеси A^+ (предполагается, что европий, в основном проявляется в виде положительно заряженного иона Eu^{+3}) должен выполняться закон электронейтральности

$$[A^+]+[D^+]=[D^-]. \quad (5)$$

Согласно закону действующих масс количественное соотношение между концентрациями заряженных центров определяется выражением

$$[D^+][D^-]=[D^0]^2=\text{const}. \quad (6)$$

Согласно (5) и (6), при введении положительно заряженной A^+ примеси концентрация D^+ -центров должна уменьшаться, а концентрация D^- -центров - увеличиваться. Действительно, при относительно больших концентрациях европия (0.5÷1 ат%) концентрация D^- -центров увеличивается (Таблица). Влияния примеси EuF_3 при малых концентрациях не происходит в рамках модели заряженных собственных дефектов, т.е. в результате участия примеси EuF_3 концентрация D^- -центров уменьшается. Такое же влияние на U -центры оказывают и примеси галогенов, т.е. примеси галогенов в малых концентрациях вследствие химической активности, образуя ковалентную связь с мышьяком и селеном, уменьшают концентрацию собственных дефектов обоих знаков [13,14]. Аналогичное влияние наблюдалось и в настоящей работе, и, по-видимому, также обусловлено химической активностью ионов РЗЭ и фтора, способных образовать химические соединения с селеном и мышьяком, в результате чего уменьшается концентрация исходных собственных дефектов.

Согласно [23] ХСП материалы, например, селенид мышьяка, к которым можно отнести и ХСП состав $\text{Se}_{95}\text{As}_5$, 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. Если принять, что введенные EuF_3 проявляются в виде ионов Eu^{3+} и F^- и в малых количествах, в основном, наполняют существующие пустоты, то они будут способствовать устранению неоднородностей, связанных с дефицитом плотности в указанных областях и, одновременно, благодаря химической активности способствовать образованию структурного элемента типа EuSe_3 , SeF_6 . Вследствие этого уменьшится концентрация оборванных связей, сопровождаемая уменьшением плотности локализованных состояний в щели подвижности, связанной с заряженными дефектами (U -центрами). При больших концентрациях примесных молекул EuF_3 ионы Eu^{3+} и F^- распределяются по всей матрице, и в щели подвижности $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ образуются новые локальные состояния, связанные с ними. Если принять, что L – активационная длина, входящая в формулу (3), соответствует размерам областей с пониженной плотностью, то можем утверждать, что вводимые примеси, не влияя на размеры указанных областей, только изменяют концентрацию заряженных собственных дефектов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований установлено, что перенос носителей заряда (дырок) в структуре $\text{Al-Se}_{95}\text{As}_5<\text{EuF}_3>\text{-Te}$ осуществляется по механизму токов монополярной инжекции, ограниченных пространственными зарядами, при участии ловушек захвата, а экспоненциальная зависимость тока от напряжения наблюдаемая при напряженности электрического поля, превышающего 10^5 В/см , объясняется ионизацией локальных состояний под действием электрического поля. Используя модель, предложенную в [9], определены энергетическое положение и концентрация локальных состояний, играющих роль эмиссионных центров. Показано, что введением примеси EuF_3 концентрация эмиссионных центров заметно изменяется, а их энергетическое положение, а также длина активации остаются неизменными и не зависят от концентрации вводимых

примесей. Предполагая, что в качестве эмиссионных выступают центры с отрицательной корреляционной энергией с уровнями энергии, расположенными вблизи середины запрещенной зоны, а также с учетом структурных особенностей ХСП материалов интерпретация полученных результатов проведена в рамках модели заряженных собственных дефектов [17]. Малые содержания примеси EuF_3 (до 0.1at%) уменьшают концентрацию глубоких ловушек, а большие (больше чем 0.1at%) - увеличивают. Поведение примеси EuF_3 в малых концентрациях объяснено химической активностью ионов РЗЭ и фтора, способных образовать химические соединения с селеном и мышьяком, в результате чего и уменьшается концентрация исходных собственных дефектов. Поведение примеси EuF_3 в больших концентрациях происходит согласно модели заряженных собственных дефектов [7]. Если принять, что примеси РЗЭ, в основном, проявляются в виде положительно заряженных ионов, то в результате их присутствия концентрация U^- -центров должна претерпевать изменения - D^+ -центры должны уменьшаться, а D^- -центры - увеличиваться, что и действительно было наблюдалось.

1. А.В.Васильев, Г.Г.Девярых, Е.М.Дианов и др., *Двухслойные халькогенидные волоконные световоды с оптическими потерями менее 30дБ/км*, *Квантовая электроника*, **20** №2 (1993) 109-110.
2. G.G.Devyatyy, M.F.Churbanov, I.V.Scripachev, et al., *Middle infrared As-S, As-Se, Ge-As-Se chalcogenide glass fibres*, *J.of Optoelectron.*, **7** (1992) 237-254.
3. V.S.Shiryaev, J.L.Adam, X.H.Zhang, et al., *Infrared fibers based on Te-As-Se glass system with low optical losses*, *J. Non. - Cryst. Solids*, **336** (2004) 113-119.
4. K.Wei, D.P.Machewirth, J.Wenzel, et al., *Pr^{3+} -doped by Ge-Ga-S glasses for 1.3 μm optical fiber amplifiers*, *J. Non.- Cryst. Solids*, **182** (1995) 257-261.
5. A.R.Hilton, *Chalcogenide Glass Optical Fibers*, *Proc. SPIE. Infrared Fiber Optics III*, **1591** (1992) 34-42.
6. К.Д.Цендин. Электронные явления в халкогенидных стеклообразных полупроводниках, СПб., Наука, (1996) 320.
7. D.Adler, M.S.Shur, M.Silver, S.R.Ovshinsky, *Threshold switching in chalcogenide-glass thin films*, *J. Appl. Phys.*, **51** (1980) 3289-3309.
8. D.Ielmini, *Threshold switching mechanism by high-field energy gain in the hopping transport of chalcogenide glasses*, *Phys., Rev. B*, **78** (2008) 035 308.
9. Э.Н.Воронков, С.А.Козюхин, *Электропроводность аморфных пленок халькогенидных соединений в сильных электрических полях*, *ФТП*, **43** (2009) 953-956.
10. Н.А.Богословский, К.Д.Цендин, *Нелинейность вольтамперных характеристик халькогенидных стеклообразных полупроводников, обусловленная многофононной туннельной ионизацией U-минус центров*, *ФТП*, **43** (2009) 1378-1382.
11. Э.А.Лебедев, С.А.Козюхин, Н.Н.Константинова, Л.П.Казаковат, *Проводимость слоев халькогенидного стеклообразного полупроводника $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ в сильных электрических полях*, *ФТП*, **43** (2009) 1383-1386.
12. Н.Ф.Мотт, Э.А.Девис, *Электронные процессы в некристаллических веществах*, М., Мир, (1982).
13. Л.П.Казакова, Э.А.Лебедев, А.И.Исаев, С.И.Мехтиева, Н.Б.Захарова, И.И.Ятлинко, *Влияние примесей галогенов на перенос носителей заряда в стеклообразной системе Se-As*, *ФТП*, **27** (1993) 959-965.
14. L.P.Kazakova, E.A.Lebedev, N.B.Zakharova, I.I.Yatlinko, A.I.Isayev, S.I.Mekhtiyeva, *Improvement of charge transport in Se-As glasses by doping with halogens*, *J. of Non – Crystalline solids*, **167** (1994) 65-69.

15. A.I.Isayev, S.I.Mekhtiyeva, N.Z.Jalilov, R.I.Alekperov, V.Z.Zeynalov, *The optical absorption of $Se_{95}As_5$ system doped by atoms of samarium*, *J.of Optoelectronics and Advanced Materials-RC, IISS*, **8** (2007) 368-372.
16. А.И.Исаев, С.И.Мехтиева, С.Н.Гарибова, Р.И.Алекперов, В.З.Зейналов, *Оптические константы халькогенидной стеклообразной полупроводниковой системы Se-As, содержащей примеси фторида европия (EuF_3)*, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXX** №2 (2010) 121-126
17. P.W.Anderson, *Model for the electronics structure of amorphous semiconductors*, *Phys. Rev. Lett.*, **34** (1975) 953-955.
18. М.Ламперт, П.Марк, *Инжекционные токи в твердых телах*. М., (1973) 416.
19. E.Voronkov, *Calculation of threshold voltage for phase-change memory device*, *J. Non.- Cryst. Solids.*, **353** (2007) 2591-2594 .
20. В.Н.Абакумов, В.Карпус, В.И.Перель, И.Н.Ясиевич, *Влияние заряда глубокого центра на многофононные процессы термоионизации и захвата электронов*, *ФТП*, **22** (1988) 262-268.
21. В.Н.Абакумов, В.И.Перель, И.Н.Ясиевич, *Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках*, *СПб., Изд-во ПИЯФ РАН*, (1997).
22. J.M.Marshall, G.R.Miller, *Field-dependent carrier transport in non-crystalline semiconductors*, *Phil. Mag.*, **27** (1973) 1151-1168
23. A.I.Popov, *Structural characteristics on non-crystalline semiconductor and semimetals*, *Semiconductors and Semimetals*, **78** (2004) 51-95.

EuF_3 AŞQARLI $Se_{95}As_5$ ŞÜŞƏVARI HALKOGENİD YARIMKEÇİRİCİNİN ELEKTRİKKEÇİRMƏSİNƏ GÜCLÜ ELEKTRİK SAHƏSİNİN TƏSİRİ

S.N.GƏRİBOVA, A.İ.İSAYEV, S.İ.MEHDIYEVA, V.Z.ZEYNALOV

Al- $Se_{95}As_5<EuF_3>$ -Te strukturunun volt amper xarakteristikasının tədqiqatı nəticəsində müəyyən olunmuşdur ki, Te elektroduna müsbət potensial tətbiq olunduğu halda, elektrikkeçirmə fəza yüklərilə məhdudlaşmış cərəyanların monopolyar injeksiyası ilə baş verir, potensialın əks istiqamətibdə isə N-tip VAX müşahidə olunur. Göstərilmişdir ki, tətbiq olunan elektrik sahəsinin intensivliyi 10^5 V/sm-dən çox olduqda tədqiq olunan strukturların elektrikkeçirmə mexanizmində U-mərkəzlərin sahəsinin təsiri ilə ionlaşması, yükdaşıyıcıların rekombinasiyası və U-mərkəzlər tərəfindən tutulması prosesləri üstün rol oynayır. Tədqiqatlar nəticəsində U-mərkəzlərə uyğun olan lokal halların enerjisi, konsentrasiyası və elektrik sahəsinin təsirini xarakterizə edən aktivləşmə uzunluğu təyin olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, EuF_3 aşqarları əsasən lokal halların konsentrasiyasına təsir edir.

INFLUENCE OF STRONG ELECTRIC FIELD ON THE CURRENT FLOW IN $Se_{95}As_5$ CHALCOGENIDE GLASS-LIKE SEMICONDUCTOR, CONTAINING EuF_3 RARE-EARTH ATOMS IMPURITIES

S.N.GARIBOVA, A.I. ISAYEV, S.I.MEKHTIYEVA, V.Z.ZEYNALOV

By investigation of current-voltage characteristics (CVC) Al- $Se_{95}As_5<EuF_3>$ -Te structure it was established that at applying Te to positive potential the current flow is carried out on the monopolar injection current mechanism limited by space charges, and at reverse polarity CVC of N-type is observed. It is shown under the field above 10^5 V/cm in current flow mechanism for investigated structure the prevailing role is a processes of thermo- field ionization of neutral and negatively charged U⁻-centres, and also electron and hole recombination processes, and charge carries capture on the U⁻-centres. Energy position and local states concentration corresponding to mentioned centres and the activation length which characterizes influence of electric field have been defined. It is established that EuF_3 impurities especially influence on local state concentration.

Редактор: Д.Араслы

УДК 544.25

ЭЛЕКТРОННО–ДЫРОЧНОЕ РАССЕЯНИЕ В КРЕМНИИ ПРИ ЛАЗЕРНОМ ВОЗБУЖДЕНИИ

А.Г.КЯЗЫМ-ЗАДЕ¹, А.М.АЛИЕВА², В.М.САЛМАНОВ¹, И.М.АЛИЕВ¹,
А.А.САЛМАНОВА³

Бакинский Государственный Университет¹

AZ 1148, г. Баку, ул. З.Халилова, 23

Институт Физики НАН Азербайджана²

AZ 1143, г. Баку, пр. Г.Джавида, 33

Азербайджанская Государственная Нефтяная Академия³

AZ 1010, г. Баку, пр. Азадлыг, 20

vagif_salmanov@yahoo.com

поступила 12.07.2011
принята к печати 15.09.2011

РЕФЕРАТ

Экспериментально исследована фотопроводимость кремния под действием лазерного излучения. Наблюдаемые особенности вольт-амперных и люкс-амперных характеристик фотопроводимости объясняются изменением подвижности носителей тока за счет рассеяния неравновесных электронов на неравновесных же дырках, генерируемых под действием мощного лазерного излучения.

Ключевые слова: лазер, кремний, фотопроводимость, электронно-дырочное рас-сеяние

ВВЕДЕНИЕ

Появление мощных источников когерентного электромагнитного излучения в оптическом диапазоне позволяет исследовать особенности взаимодействия такого излучения с веществом в весьма широком интервале интенсивностей. При высоких интенсивностях заметную роль начинают играть различного рода нелинейные эффекты взаимодействия излучения с веществом, а обычные механизмы поглощения и рассеяния света приобретают специфическую окраску из-за большого удельного энерговыделения. В настоящее время эти явления привлекают большое внимание исследователей, причем рассматривается как специфика взаимодействия интенсивного электромагнитного излучения с веществом, так и вопросы прикладного характера в связи с разработкой новых технологических операций, усовершенствования лазерной техники. Так как поглощение мощного лазерного излучения в полупроводниках способствует увеличению концентрации неравновесных носителей, то представляет самостоятельный интерес изучение неравновесных электронных процессов, в частности, явления фотопроводимости в широком интервале интенсивности. При этом генерация больших концентраций неравновесных носителей может явиться одной из причин, ограничивающих подвижность в полупроводниках за счет электронно-дырочного рассеяния. Естественно, что указанный эффект будет играть особенно существенную роль в полупроводниках, находящихся при низкой температуре и содержащих малое количество заряженных примесей. Для описания электронно-дырочного рассеяния (ЭДР) предлагается использовать выражения для обычного рассеяния носителей на заряженных примесных центрах с заменой массы рассеиваемого носителя приведенной массой электрона и дырки. Экспериментальное исследование ЭДР сопряжено с рядом трудностей и, в первую очередь, с необходимостью высокой равномерности генерации больших концентраций неравновесных электронно-дырочных пар. Ранее, в работе [1], была

предпринята попытка экспериментального исследования этого эффекта в Ge, причем генерация осуществлялась при комнатной температуре через p-n переход, что естественно не могло обеспечить высокую точность в выполнении указанных выше условий и, соответственно, в измерении величины инжектируемой концентрации носителей. С этой точки зрения гораздо более перспективным представляется световое возбуждение и, в частности, возбуждение кремния при низких температурах светом неодимового лазера с длиной волны $\lambda=1,06\mu\text{м}$. Использование излучения неодимового лазера позволяет получать высокую и весьма равномерную объемную генерацию неравновесных носителей в Si без заметного нагрева образца ввиду малого коэффициента поглощения $\alpha 2 \cdot 10^{-2} \text{см}^{-1}$ [2] при 4,2K на этой длине волны.

Следует отметить, что благодаря своим термодинамическим, физико-химическим и полупроводниковым свойствам кремний получил широкое применение в микроэлектронике, сенсорной технологии, биомедицине и т.д. Причем интерес к воздействию на кремний лазерного излучения непрерывно растет. В частности, в настоящее время активно изучается возможность использования текстур, получаемых на поверхности полупроводникового материала под действием лазерного излучения, для создания перспективных конструкций солнечных элементов [3-10].

С целью экспериментального исследования ЭДР нами изучалась зависимость фотопроводимости от электрического поля и интенсивности возбуждения в Si при 4,2K при возбуждении светом неодимового лазера с модулированной добротностью.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для измерения фотопроводимости (ФП) были введены система регистрации импульса ФП и система согласования импульса лазера и импульса напряжения, подаваемого на образец. При этом в качестве импульсного источника напряжения мы использовали генератор Г5-15 с переменной задержкой импульса выхода относительно импульса, который являлся результатом совпадения опорного импульса (снимаемого с фотодиода) и импульса поджига тиратрона в системе накачки лазера (Рис. 1). Время задержки подбиралось таким образом, что при длительности импульса от генератора $7 \div 8 \mu\text{сек}$ вспышка лазера происходила приблизительно через $2 \div 3 \mu\text{сек}$ после начала импульса напряжения. При этом напряжение питания оставалось постоянным в течение всего времени релаксации ФП после лазерной вспышки.

Сигнал ФП снимаемый с нагрузочного сопротивления через катодный повторитель поступал на запоминающий однократные импульсы осциллограф. Запуск развертки осциллографа производился от фотодиода, на который отводилось около 8% энергии лазерной вспышки с помощью стеклянной плоско-параллельной пластинки. Нагрузочное сопротивление выбиралось так, чтобы сопротивление нагрузки R_H было значительно меньше светового сопротивления образца $R_{св.}$. При этом справедлива формула

$$\Delta\sigma = \frac{I_l}{(V - I_l)SR_l}, \quad (1)$$

где $\Delta\sigma$ -изменение проводимости, I_l -регистрируемый на осциллографе сигнал, V -напряжение питания схемы ФП, l -длина, S - площадь поперечного сечения образца.

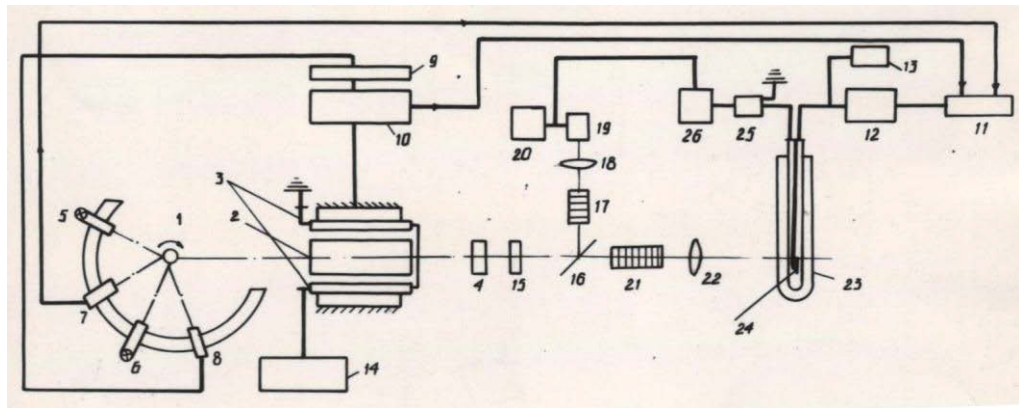


Рис.1.

Схема экспериментальной установки:

1- вращающаяся призма; 2-неодимовый стержень; 3-импульсная лампа; 4-сепаратор мод; 5, 6 – лампы накаливания; 7, 8, 19 – фотодиоды; 9 – генератор импульса с линией задержки; 10 – генератор импульса и поджига лампы; 11 – схема совпадения; 12 – генератор Г5-15; 13 – контрольный осциллограф; 14 – система накачки и автоматика для ограничения напряжений; 15 – светофильтр для отсекания света импульсной лампы; 16 – плоскопараллельная пластинка; 17, 21 – нейтральные фильтры для изменения интенсивности света; 18, 22 – линзы; 20, 26 - осциллографы; 23 – стеклянный дьюар для жидкого гелия и азота; 24- исследуемый образец; 25 – нагрузочное сопротивление.

Образцы при измерении находились при температуре жидкого гелия и были приготовлены из монокристаллов кремния n-и p-типа, их удельное сопротивление составляло $\rho = 100 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ и $\rho = 2500 \text{ Ом} \cdot \text{см}$, соответственно. Образцы представляли собой параллелепипеды со средними размерами $4 \times 2 \times 0,2 \text{ мм}$. Омические контакты на них наносились путем химического осаждения никеля, вжиганием его в вакууме при $t=650^\circ\text{C}$ и вторичного осаждения никеля. К этим контактам оловом припаивались мягкие никеливые проволочки. Качество контактов проверялось на характериографе. Лазерный пучок фокусировался таким образом, что освещалась вся межконтактная область образца.

Исследование ФП проводилось путем снятия люкс-амперных (ЛАХ) и вольтамперных (ВАХ) характеристик. При этом интенсивность света изменялась с помощью калиброванных нейтральных фильтров. Набор фильтров позволял снижать интенсивность на $4 \div 6$ порядков.

РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Фотопроводимость, как функция электрического поля, представлена на Рис.2. При малых интенсивностях света при $4,2\text{K}$ наблюдается спад фотопроводимости $\Delta\sigma$ с полем приблизительно по закону $\Delta\sigma \sim E^{-1/2}$ (Рис.2, кривая 1). Такая зависимость может быть результатом разогрева носителей в электрическом поле, что приводит к уменьшению подвижности, обусловленной рассеянием на акустических фоновых, по корневому закону [11]. При повышении интенсивности возбуждения вместо спада с увеличением поля наблюдается постоянство или даже некоторое возрастание фотопроводимости и лишь при больших полях видна тенденция к спаду (Рис.2, кривые 2 и 3).

Качественно такой ход можно объяснить следующим образом. При повышении интенсивности света и, соответственно, концентрации неравновесных носителей становится существенным некоторый дополнительный механизм рассеяния, заметно ограничивающий подвижность, причем подвижность, обусловленная этим новым механизмом, не только не падает с полем, а даже

обнаруживает тенденцию к нарастанию. Таким дополнительным механизмом может явиться рассеяние неравновесных электронов на неравновесных же дырках.

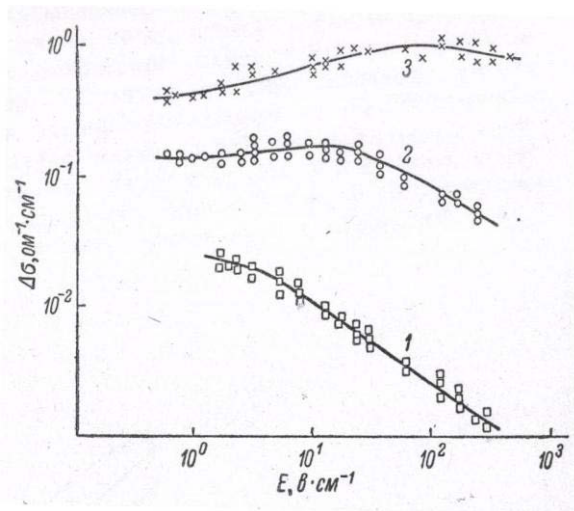


Рис.2.

Зависимость фотопроводимости от напряженности электрического поля при различных уровнях возбуждения. I , кв./см²·сек.: 1 - $1 \cdot 10^{21}$, 2 - $1 \cdot 10^{22}$, 3 - $5 \cdot 10^{23}$, $T=4,2K$.

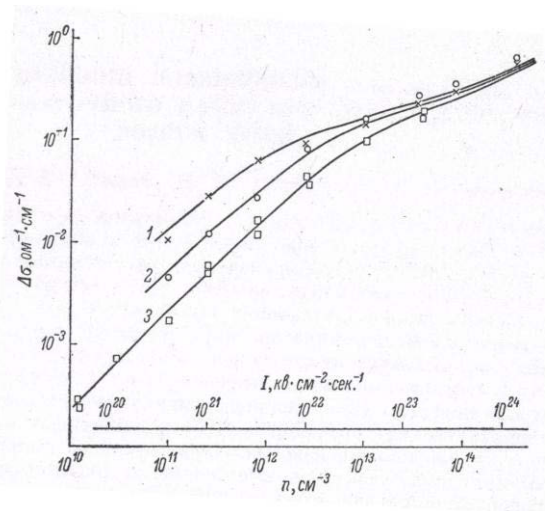


Рис.3.

Фотопроводимость как функция уровня возбуждения при различной напряженности электрического поля E (В/см): 1 - 2,9; 2 - 29; 3 - 290, $T=4,2K$, расчетные - сплошные линии.

Для проверки этого нами исследовались зависимости фотопроводимости от интенсивности возбуждения при различных электрических полях (Рис.3). При этом концентрация неравновесных электронно-дырочных пар определялась из абсолютной величины фотопроводимости при малом уровне возбуждения с учетом известной величины подвижности электронов и дырок в слабом электрическом поле ($\mu_{n_0} \approx \mu_{p_0} = 5 \cdot 10^5 \text{ см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ сек}^{-1}$ при 4,2K). Концентрация носителей при больших уровнях возбуждения считалась пропорциональной интенсивности света, так как время жизни значительно больше длительности лазерного импульса.

Как видно из Рис.3, при всех электрических полях с повышением концентрации неравновесных носителей наблюдается отклонение от линейного хода фотопроводимости, что может явиться следствием существенного влияния электронно-дырочного рассеяния при высоких концентрациях. Мы попытались сравнить наблюдаемые зависимости с расчетными, учитывающими как решеточную подвижность μ_0 , так и μ_{np} , обусловленную ЭДР. При этом для вычисления μ_{np} использовалась формула Брукса-Херринга [12] с включением фактора 0.29, учитывающего электрон-электронные столкновения в случае, когда рассеяние определяется заряженными центрами

$$\mu_{np} = \frac{2^{7/2} \varepsilon^2 (kT)^{3/2} (m_n + m_p)^{1/2}}{\pi^{3/2} e^3 (m_n m_p)^{1/2} [\ln(1+B) - B/(1+B)]}, \quad (2)$$

$$\text{где } B = \frac{6\varepsilon(kT)^2 m_n m_p}{\pi \hbar e^2 (m_n + m_p)(np)^{1/2}}.$$

Соответствующие теоретические зависимости представлены на Рис.3 сплошными линиями. Обращает на себя внимание весьма хорошее соответствие между экспериментальными и теоретическими зависимостями, особенно в случае малых полей, когда разогрев носителей еще не существен, а также больших полей, при которых ввиду существенного уменьшения решеточной подвижности ее

величина при максимальных уровнях возбуждения оказывается соизмеримой с μ_{np} . Решеточная подвижность при полях, когда необходимо учитывать ее изменение за счет разогрева в поле, определялась из кривых, подобных кривой 1 Рис.2, а в промежуточном случае (Рис.3, кривая 2) теоретическая зависимость идет несколько ниже экспериментальной, поскольку при расчете не учитывалось увеличение μ_{np} за счет разогрева носителей в поле.

В заключение отметим, что приведенные результаты свидетельствуют о необходимости учета при низких температурах электронно-дырочного рассеяния во всех случаях, когда имеются электронно-дырочные пары, генерированные под действием мощного лазерного излучения.

1. L.W.Davies, Silicon diodes made by laser irradiation, *Nature*, **194** (1972) 762-769.
2. A.M.Dean, *Rapid reversible light-induced crystallization of amorphous semiconductors*, *Phys. Rev.*, **163** (1977) 721-726.
3. V.S.Makin, Y.I.Pestov, *Laser-induced tip-shaped pump formation on silicon and germanium surfaces*, *X International Conference "Nonresonant Laser-Matter Interaction"*, St. Petersburg, (2000) 37-40.
4. Ю.Блумс, Е.И.Гацкевич, Г.В.Ивлев, *Образование донорных центров в кремнии под действием импульсного лазерного излучения*, 4-я Межд. Конф. «Взаимодействие излучений с твердым телом», Минск, (2001)108-110.
5. В.А.Володин, Е.И.Гацкевич, А.В.Двуреченский, М.Д.Ефремов, Г.Д.Ивлев, А.И.Никифоров, Д.А.Орехов, А.И.Якимов, *Модифицирование нанокластеров германия в кремнии под действием импульсного лазерного излучения*, *ФТП*, **37** (2003) 1352-1357.
6. А.Ф.Банишев, В.С.Голубев, А.Ю.Кремнев, *Разрушение поверхности кремния при импульсном воздействии лазерных импульсов*, *ЖТФ*, **74** №8 (2004) 81-85.
7. В.Я.Панченко, О.А.Новодворский, В.С.Голубев, *Технология лазерно-плазменного напыления пленок нанометровых толщин*, *Наука и технологии в промышленности*, **4** (2006) 39-51.
8. С.В.Заботнов, А.А.Ежов, Л.А.Головань, М.А.Ластовкина, В.И.Панов, В.Ю.Тимошенко, П.К.Кашкаров, *Формирование наночастиц на поверхности кремния под действием фемтосекундных лазерных импульсов*, *ФТП*, **41** (2007) 1018-1020.
9. А.Д. ирюхин, В.В. ригорьев, А.В.Зуев, В.В.Зуев, Н.А.Королев, *Форма сигналов нестационарной фотопроводимости в кремнии, легированным золотом или серой*, *ФТП*, **41** (2007) 269-272.
10. Г.А.Качурин, С.Г.Черкова, В.А.Володин, Д.В.Марин, M.Deutschmann. *Действие мощных нано- и фемтосекундных лазерных импульсов на кремниевые наноструктуры*, *ФТП*, **42** (2008) 181-185.
11. Ф.Д.Блатт, *Теория подвижности электронов в твердых телах*, ГИ ФМЛ, Москва, (1963) 143.
12. F.J.Morin, J.P.Majta, *Properties of Si diodes prepared by alloying al into n-type Si with heat pulses from a Nd:YAG laser*, *Phys. Rev.*, **94** (1974) 1525-1531.

**A.H.KAZIMZADƏ, A.M.ƏLİYEV, V.M.SALMANOV, İ.M.ƏLİYEV,
A.A.SALMANOVA**

Lazer şüalarının təsiri ilə Si kristallarının fotokeçiriciliyi təcrübi olaraq tədqiq edilmişdir. Fotokeçiriciliyin volt-ampere və lyuks–ampere xarakteristikalarında müşahidə olunan xüsusiyyətlər lazer şüalarının təsiri ilə generasiya olunan yükdaşıyıcıların yüklüyünün qeyri-tarazlıqda olan elektronların qeyri-tarazlıqda olan dəşiklərdən səpilmə mexanizmi ilə izah olunur.

ELECTRON-HOLE SCATTERING IN SILICON AT LASER EXCITATION

A.G.KYAZYM-ZADE, A.M.ALIEVA, V.M.SALMANOV, I.M.ALIEV, A.A.SALMANOVA

The photoconductivity of silicon crystals under action of laser radiation have been investigated experimentally. Observable features volt-ampere and lyuks-ampere characteristics of photoconductivity have been explicated by mobility change of current carrier due to scattering nonequilibrium electrons on nonequilibrium holes, generated under action of powerful laser radiation.

Редактор: М.Алиев

УДК 621.315.592

ОСОБЕННОСТИ ИНДУЦИРОВАННОЙ ПРИМЕСНОЙ ФОТОПРОВОДИМОСТИ В КРИСТАЛЛАХ МОНОСЕЛЕНИДА ИНДИЯ

А.Ш.АБДИНОВ, Р.Ф.БАБАЕВА*, Р.М.РЗАЕВ

*Бакинский Государственный Университет
Азербайджанский Государственный Экономический Университет**
AZ 1145, г. Баку, ул. З.Халилова, 23
abdinov_axmed@yahoo.com
Babaeva-Rena@yandex.ru

поступила 12.02.2011 принята к печати 18.06.2011	РЕФЕРАТ Рассмотрены особенности индуцированной примесной фотопроводимости (ИПФ) в чистых и легированных с различным содержанием атомами гольмия монокристаллах селенида индия. Установлено, что в высокоомных чистых и слаболегированных атомами гольмия кристаллах моноселенида индия для полного объяснения механизма ИПФ, помимо наличия уровней прилипания в запрещенной зоне, необходимо учитывать также значительную роль флуктуации потенциала свободных энергетических зон, возникшей вследствие частичной неупорядоченности этого материала.
Ключевые слова: индуцированная примесная фотопроводимость, токовые контакты, уровень возбуждения, уровень легирования, фоновая подсветка, примесный свет, высокоомные кристаллы, двухбарьерная энергетическая модель.	

ВВЕДЕНИЕ

Моноселенид индия (n-InSe) с первых же дней своего открытия привлекает внимание исследователей как полупроводник с высокой фоточувствительностью и разнообразными фотоэлектрическими свойствами [1-3]. В ходе ранее проведенных исследований установлено, что в кристаллах этого материала хотя обычная положительная примесная фотопроводимость не наблюдается, однако имеет место значительная индуцированная примесная фотопроводимость (ИПФ) [4] со специфическими не до конца выясненными особенностями [5-7].

В данной работе рассмотрены некоторые моменты ИПФ в чистых (специально нелегированных) и легированных атомами гольмия (Ho) монокристаллах ($N_{Ho} \approx 10^{-5} \div 10^{-1}$ ат.%) n-InSe.

МЕТОДИКА

Изучаемые образцы срезались из крупных слитков n-InSe и n-InSe<Ho>, выращенных по описанной в [8] методике. При 77К удельное темновое сопротивление (ρ_T) различных образцов чистых и легированных кристаллов составляло $\sim 10^3 \div 10^7$ и $\sim 10^2 \div 10^9$ Ом·см, соответственно.

Токовые контакты создавались путем припаивания металлического индия в открытой атмосфере. Бралась образцы с поперечными и продольными контактами (образцы, в которых ток протекает в направлении параллельно и перпендикулярно оси «С» кристалла, соответственно). Оказалось, что геометрия образцов влияет лишь на численные значения отдельных параметров ИПФ, но не вызывает качественных изменений.

Измерения проводились в широком интервале изменения температуры (77÷350 К), электрического поля ($E \leq 2.5 \cdot 10^3$ В/см), длины волны ($0.30 \leq \lambda \leq 4.00$ мкм) и интенсивности (вплоть до $\sim 5 \cdot 10^2$ Лк) света при помощи экспериментальной

установки, собранной на базе двух монохроматоров (МДР-12 и МДР-12 У) со сменными (кварцевыми и флюоритовыми) линзами и источниками света (лампой накаливания и ртутной лампы). При всех рассмотренных нами случаях освещение образца осуществлялось по плоскости «С» кристалла.

ЭКСПЕРИМЕНТ

В результате проведенных измерений установлено, что в обеих группах кристаллов при $T \leq 150\text{K}$ наблюдается ярковыраженная индуцированная примесная фотопроводимость (ИПФ) различного происхождения, т.е. индуцированная фоновой подсветкой из области собственного поглощения (ИСПФ) и (или) внешним электрическим напряжением, большего некоторого граничного (ИИПФ). Эта (индуцированная) полоса фоточувствительности при высоких уровнях возбуждения, т.е. при больших интенсивностях фоновой подсветки ($\Phi_{\text{ф}}$) и (или) больших значениях внешнего электрического напряжения (U_i) охватывает диапазон длины волны $1.90 \leq \lambda \leq 3.60 \mu\text{м}$ и имеет максимум при $\lambda = 2.60 \mu\text{м}$.

С повышением уровня возбуждения (с увеличением $\Phi_{\text{ф}}$, или U_i) ширина спектра ИПФ несколько уменьшается, максимум и красная граница его (спектра) смещаются в сторону более коротких длин волн, а длинноволновая ветвь – спадает более резко (Рис.1).

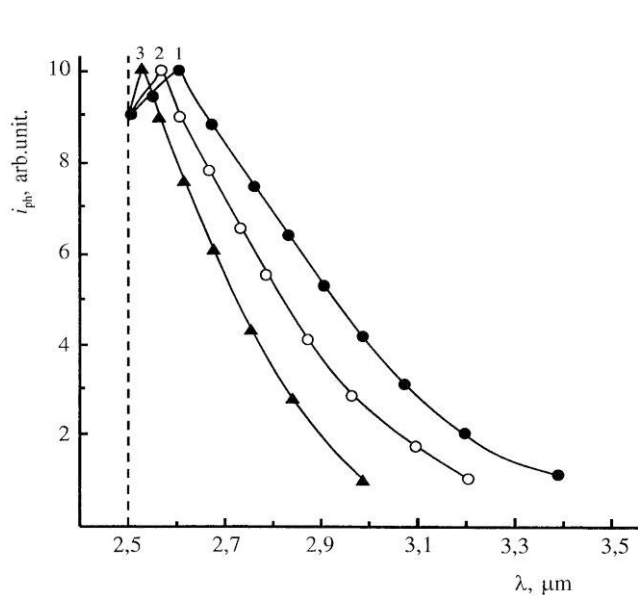


Рис.1.

Спектр ИСПФ в кристаллах $n\text{-InSe}\langle\text{Ho}\rangle$ при различных интенсивностях фоновой подсветки: $T=77\text{K}$, $\lambda_{\text{ф}}=0.95\mu\text{м}$, $N_{\text{Ho}}=10^{-3}\text{ат.}\%$, $U=5\text{В}$, $\Phi_{\text{П}}=0.8\Phi_{\text{ПМ}}$, $\Phi_{\text{ф}}(\text{от.ед.})$:
1 - 0.1; 2 - 0.4; 3 - 0.8.

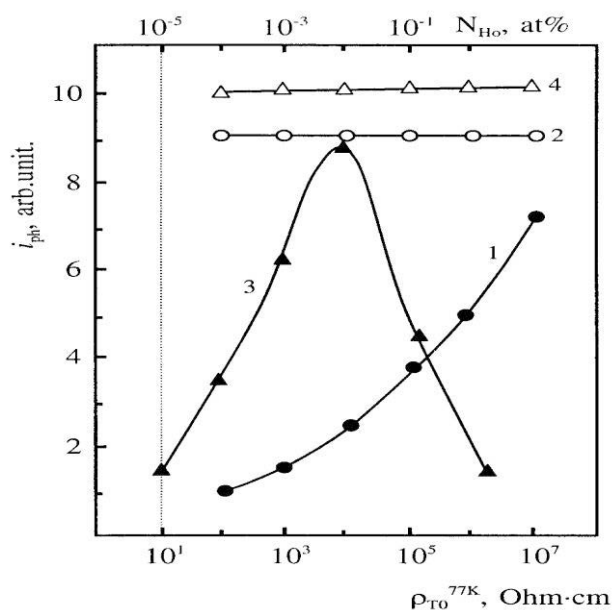


Рис.2.

Зависимость величины ИПФ ($i_{\text{фп}}$) от темнового удельного сопротивления (кр.1 и 2) и уровня легирования (кр.3 и 4) кристаллов $n\text{-InSe}$ при различных интенсивностях фоновой подсветки. $T=77\text{K}$, $\lambda_{\text{ф}}=0.95\mu\text{м}$, $U=5\text{В}$, $\lambda_{\text{П}}=2.60\mu\text{м}$, $\Phi_{\text{П}}=0.8\Phi_{\text{ПМ}}$; $\Phi_{\text{ф}}(\text{от.ед.})$: 1, 3 - 0.2; 2, 4 - 1.0.

В отличие от случая умеренных уровней возбуждений (Рис.2, кр.2 и 4), при низких уровнях возбуждений (при слабых $\Phi_{\text{ф}}$ и U_i) величина $i_{\text{фп}}$ (рис.2) и основные параметры спектра ИПФ (положение максимума и красной границы, а также резкость спада длинноволновой ветви) (Рис.3) меняются с $\rho_{\text{т}}$ (Рис.3, а) и $N_{\text{Н0}}$ (Рис.3, б) в чистых и легированных кристаллах, соответственно. В чистых кристаллах n-InSe с ростом $\rho_{\text{т}}$ резкость спада длинноволновой ветви спектра увеличивается, а максимум и красная граница его смещаются в сторону более длинных волн (Рис.3, а). Влияние уровня легирования на величину (Рис.2, кр.3) и спектр (Рис.3, б) ИПФ имеет немонотонный характер: с ростом $N_{\text{Н0}}$ сначала (при $N_{\text{Н0}} < 10^{-3}$ ат.%) увеличивается, а далее ослабляется.

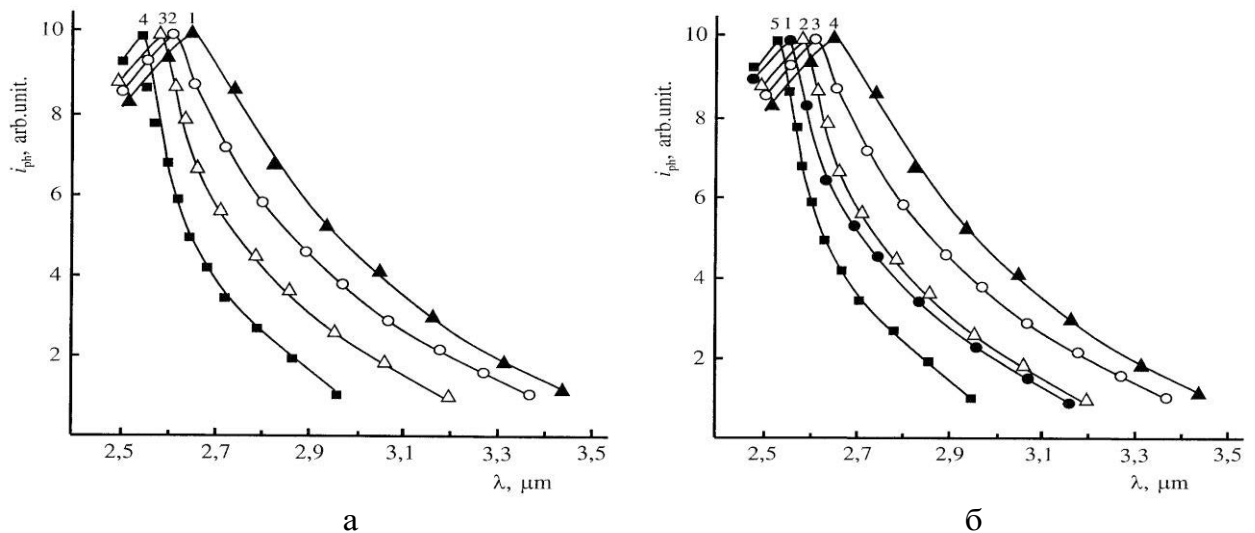


Рис.3.

Спектр ИСПФ в кристаллах n-InSe с различным темновым удельным сопротивлением (а) и при различных уровнях легирования (б) $T=77\text{K}$, $\lambda_{\text{ф}}=0.95\text{мкм}$, $\Phi_{\text{п}}=0.6\Phi$, $\Phi_{\text{п}}=0.8\Phi_{\text{пм}}$, $U=5\text{В}$;
а) $\rho_{\text{т}}^{77\text{K}}(\text{Ом}\cdot\text{см})$: 1 – 10^6 ; 2 – 10^5 ; 3 – 10^4 ; 4 – 10^2 ; б) $N_{\text{Н0}}(\text{ат.}\%)$: 1 – 0; 2 – 10^{-5} ; 3 – 10^{-4} ; 4 – 10^{-3} ; 5 – 10^{-1} .

Зависимость $i_{\text{фп}}(\Phi_{\text{ф}})$ имеет степенной характер ($i_{\text{фп}} \sim \Phi_{\text{ф}}^{\alpha}$). При этом в зависимости от значений $\rho_{\text{т}}$, $\Phi_{\text{ф}}$ (или U_i) и $N_{\text{Н0}}$ величина α (показатель степени $i_{\text{фп}}$ от $\Phi_{\text{ф}}$) меняется в пределах $0 \leq \alpha \leq 1$.

В высокоомных кристаллах при напряжениях $U > U_{\text{пзл}}$ (где $U_{\text{пзл}}$ - напряжение предельного заполнения уровней прилипания [9]) наблюдается резкий спад $i_{\text{фп}}$ с U_i , что, по-видимому, связано с туннельным опустошением уровней прилипания [10].

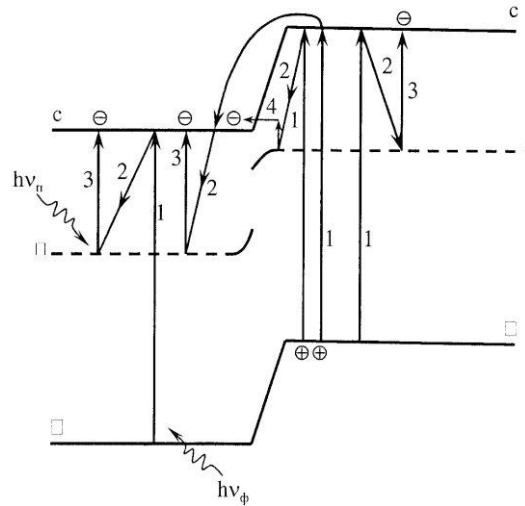
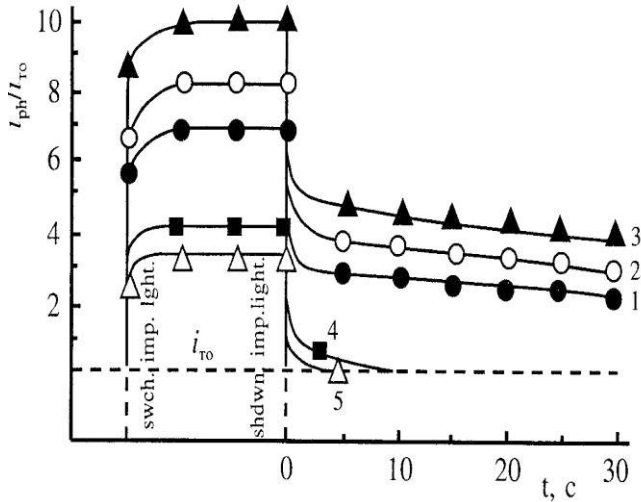
Что касается зависимости $i_{\text{фп}}$ от интенсивности примесного света ($\Phi_{\text{п}}$), прежде всего следует отметить, что при этом ситуация больше контролируется величиной возбуждающего фактора (значением $\Phi_{\text{ф}}$ или U_i), чем $\Phi_{\text{п}}$. При слабых уровнях возбуждения зависимость $i_{\text{фп}}(\Phi_{\text{ф}})$ состоит из последовательных суперлинейного, линейного и сублинейного участков.

С понижением уровня возбуждения (уменьшением $\Phi_{\text{ф}}$ и U_i) величина $i_{\text{фп}}/i_{\text{т}}$ (где $i_{\text{т}}$ - значение темнового тока через образец) увеличивается.

Выявлено, что время установления стационарного значения ИПФ при включении примесного света ($\tau_{\text{ст}}$) зависит от ряда факторов, таких как $\Phi_{\text{ф}}$, U_i , $\rho_{\text{т}}$, $N_{\text{Н0}}$ и $\Phi_{\text{п}}$. При низких уровнях возбуждения в высокоомных чистых (с $\rho_{\text{т}} \geq 10^4 \text{Ом}\cdot\text{см}$ при 77K) и слабелегированных ($N_{\text{Н0}} \leq 10^{-3} \text{ат.}\%$) кристаллах n-InSe процесс установления стационарного значения ИПФ ($i_{\text{пс}}$) имеет медленный характер. С

ростом уровня возбуждения и легирования, а также с уменьшением ρ_T , этот процесс ускоряется. Значение τ_{CT} - уменьшается также с ростом Φ_P .

В высокоомных n-InSe и слаболегированных n-InSe<Ho> кристаллах процесс спада (исчезновения) ИПФ после прекращения воздействия примесного света оказывается долговременным - наблюдается ярковыраженная остаточная ИПФ. Установлено, что величина $\Delta i_{по}/i_{фп}$ (где $\Delta i_{по}$ – значение остаточного ИПФ) и время



запоминания τ_{CT} остаточной ИПФ при этом зависят от уровня возбуждения, а также от значения ρ_T , N_{Ho} (Рис.4).

Рис.4.

Кинетика ИПФ в кристаллах n-InSe с различным ρ_T (кр.1 и 4) и n-InSe<Ho> с различным N_{Ho} (кр.2, 3 и 5).
 $T=77K$, $\lambda_f=0.95\mu m$, $\Phi_P=0.8\Phi_{PM}$, $\Phi_f=0.4\Phi_{FM}$,
 $\lambda_P\approx 2.6\mu m$, $U=5B$; N_{Ho} (ат. %): 1, 4 – 0; 2 – 10^{-5} ; 3 – 10^{-3} ;
 5 – 10^{-1} ; ρ_T^{77K} (Ом·см): 1 – 10^6 ; 4 – 10^2 .

Рис.5.

Энергетическая модель высокоомных кристаллов моноселенида индия и схема электронных переходов, обуславливающих ИПФ в них.

Установлено, что в изучаемых кристаллах как значение ИПФ ($i_{фп}$), так и ход кривых $i_{фп}(\Phi_f)$, $i_{фп}(U_i)$, $i_{фп}(\Phi_P)$ зависят от ρ_{T0} , N_{Ho} и температуры. С уменьшением ρ_T протяженность начального сублинейного участка кривых $i_{фп}(\Phi_P)$ постепенно укорачивается и наконец (при $\rho_T^{77K} < 10^3 \text{ Ом·см}$) совсем исчезает. С уменьшением ρ_T уменьшается также величина $i_{фп}$. Аналогичная ситуация наблюдается и при повышении температуры. В изучаемых кристаллах при $T \geq 150 \text{ K}$ ИПФ не наблюдается.

С ростом N_{Ho} сначала (при $N_{Ho} \leq 10^{-3} \text{ ат. %}$) как протяженность начального сублинейного участка кривых $i_{фп}(\Phi_f)$, так и величина $i_{фп}$ увеличиваются, а затем (при $N_{Ho} \approx 10^{-3} \text{ ат. %}$), проходя через максимум, оба уменьшаются. При $N_{Ho} \approx 10^{-1} \text{ ат. %}$ хотя параметры и характеристики ИПФ, в том числе зависимость $i_{фп}(\Phi_f)$ становятся более стабильными и высоковоспроизводимыми, однако, во-первых, на этой зависимости отсутствует начальный сублинейный участок, во-вторых, величина $i_{фп}$ оказывается даже меньшей, чем имеющая место в низкоомных чистых кристаллах.

При слабых Φ_f в чистых кристаллах n-InSe с ростом температуры и уменьшением ρ_T протяженность начального сублинейного участка зависимости $i_{фп}(\Phi_P)$ и величина $i_{фп}$ резко уменьшаются, а в кристаллах n-InSe<Ho> хотя с ростом

температуры значение $i_{\text{фп}}$ уменьшается, однако как $i_{\text{фп}}$, так и параметры зависимости $i(\Phi_{\text{л}})$ с N_{Ho} меняются немонотонно.

Установлено, что среди основных характеристик ИПФ ее кинетика сравнительно сильно зависит как от ρ_{T} (Рис.4., кр.1 и 4), так и от уровня легирования (Рис.4, кр.2, 3, 5) и температуры. С повышением температуры, а также с уменьшением ρ_{T} величина ($\Delta i_{\text{по}}$) и время релаксации ($\tau_{\text{фл}}$) остаточной ИПФ резко уменьшаются. В низкоомных кристаллах ($\rho_{\text{T}}^{77\text{K}} \leq 10^3 \text{ Ом} \cdot \text{см}$) вообще (Рис. 4, кр. 4), а в высокоомных кристаллах при $T > 150\text{K}$ остаточная ИПФ не наблюдается. Влияние уровня легирования на кинетику ИПФ имеет немонотонный характер (Рис. 4, кр. 2, 3, 5). С ростом N_{Ho} сначала (при $N_{\text{Ho}} < 10^{-3} \text{ ат.}\%$) увеличивается как $\Delta i_{\text{по}}$, так и $\tau_{\text{фл}}$, а далее оба уменьшаются, и в кристаллах с $N_{\text{Ho}} \approx 10^{-1} \text{ ат.}\%$ остаточной ИПФ не наблюдается (Рис. 4, кр. 5).

ОБСУЖДЕНИЕ

ИПФ к настоящему времени обнаружена в различных полупроводниках и полученные при этом результаты удовлетворительно объяснялись на основе предложенной в [4] модели. Эта модель в общих чертах удовлетворительно объясняет и ИПФ в кристаллах моноселенида индия. Однако при этом ряд особенностей, в частности, специфика кинетики, световой и спектральной характеристик, зависимостей от уровня возбуждения и легирования, а также от значения темнового удельного сопротивления кристаллов не находят своего исчерпывающего объяснения. Предполагаем, что с целью полного и детального объяснения ИПФ в кристаллах n-InSe при рассмотренных нами условиях необходимо использовать адаптированный вариант предложенной в [4] модели. Вернее, помимо доминирующей роли существующих в запрещенной зоне мелких уровней прилипания, следует обязательно учитывать также специфику потенциального рельефа свободных энергетических зон кристаллов моноселенида индия.

Как показано в ранних работах [2,3,7,11] высокоомные кристаллы моноселенида индия могут описываться двухбарьерной (рекомбинационный и дрейфовый) энергетической моделью [12] частично-неупорядоченного полупроводника, состоявшего в целом из низкоомной матрицы (НО) с хаотическими высокоомными включениями (ВО), в запрещенной зоне которых существуют локальные уровни различного типа, в том числе мелкие уровни прилипания. Причем плотность последних (мелких уровней прилипания) в НО, значительно больше, чем в ВО (Рис.5). На границах НО-ВО существуют рекомбинационные, а между соседними ВО – дрейфовые барьеры (Рис.5).

В отличие от высокоомных в низкоомных чистых кристаллах n-InSe такая неупорядоченность отсутствует, вернее, является совсем незначительной. Поэтому в таких кристаллах без всякого ущерба можно пренебречь ролью обоих типов барьера в электронных процессах, в том числе в ИПФ. При этом можно не учитывать также неравномерность распределения уровней прилипания по объему образца. В таких (низкоомных) чистых кристаллах все электронные процессы, в том числе ИПФ, с единых позиций могут удовлетворительно объясняться на основе модели кристаллического полупроводника с равномерно распределенными по всему объему уровнями прилипания [4].

В высокоомных же кристаллах в области низких температур, помимо концентрационного, необходимо учесть также влияние подвижностного компонента изменения проводимости и значительной зависимости процесса рекомбинации от наличия и параметров рекомбинационных барьеров. При этом

генерированные под действием фоновой подсветки ($h\nu_{\text{ф}}$) основные носители тока (Рис.5, пер.1) сначала, захватываясь уровнями прилипания (Рис.5, пер.2), заполняют их, далее, высвобождаясь под действием света из области примесного поглощения ($h\nu_i$) (Рис.5, пер.3) создают индуцированную примесную фотопроводимость. В отличие от низкоомных кристаллов при этом возможность туннельного перехода захваченных на уровнях прилипания неравновесных носителей тока в зону проводимости (Рис.5, пер.4) обеспечивает осуществление также облегченной туннелированием индуцированной примесной фотопроводимости. Последний приводит к смещению максимума и красной границы спектра ИПФ в сторону более длинных волн, а также уменьшению резкости спада его (спектра ИПФ) длинноволновой ветви по сравнению с имеющимся место в низкоомных кристаллах.

Дрейфовые барьеры и обусловленный с ними подвижностный компонент изменения проводимости значительным образом определяют величину и скорость установления стационарного значения ИПФ при включении примесного света. Рекомбинационные барьеры, во-первых, обуславливают облегченную туннелированием индуцированную примесную фотопроводимость (при включении примесного света), во-вторых, вызывают долговременную релаксацию ИПФ после прекращения воздействия примесного света, т.е. наблюдение остаточной ИПФ. Повидимому, зависимость положения максимума и красной границы спектра ИПФ от ρ_T , N_{Ho} и уровня возбуждения тоже обусловлены соответствующей зависимостью вероятности облегченной туннелированием индуцированной примесной фотопроводимости от этих факторов. Большая величина ρ_T в чистых кристаллах является показателем больших размеров и числа ВО. Поэтому в таких кристаллах вероятность облегченных туннелированием через рекомбинационные барьеры процессов высока. Рост высоты рекомбинационных барьеров (в чистых кристаллах с большим ρ_T) сопровождается смещением максимума и красной границы спектра ИПФ в сторону более длинных волн.

В рамках предложенной модели можно предполагать, что при высоких уровнях возбуждения (при больших $\Phi_{\text{ф}}$ и U_i) происходит оптическое и (или) электрическое, соответственно, сглаживание потенциального рельефа свободных энергетических зон изучаемого полупроводника. Поэтому при таких условиях эффекты, обусловленные наличием дрейфовых и рекомбинационных барьеров, исчезают и наблюдается ИПФ, обусловленная лишь наличием соответствующих уровней прилипания в запрещенной зоне полупроводника.

В кристаллах n-InSe<Ho> в зависимости от уровня легирования немонотонно меняется амплитуда флуктуации потенциала свободных энергетических зон, что, в свою очередь, приводит к соответствующей немонотонной зависимости времени релаксации при установлении стационарного значения и исчезновении ИПФ, а также эффектов, обусловленных туннелированием находящихся на уровнях прилипания неравновесных носителей тока через рекомбинационные барьеры. В кристаллах n-InSe<Ho> с $N_{\text{Ho}} \approx 10^{-1}$ ат.% из-за высокой степени сглаживания потенциального рельефа и увеличения вклада ковалентной связи между соседними слоями [13] наблюдаются более стабильные и высоковоспроизводимые результаты, которые присущи модели упорядоченного кристаллического полупроводника [4].

В рамках предложенной модели влияние температуры на ИПФ может объясняться как температурным сглаживанием флуктуации потенциала свободных энергетических зон, так и термическим опустошением мелких уровней прилипания.

Что касается отсутствия обычной примесной фотопроводимости в чистых и легированных кристаллах моноселенида индия, оно, прежде всего, обусловлено

тем, что под действием примесного света, хотя возбуждаются неравновесные носители тока из существующих в запрещенной зоне неконтролируемых или специально введенных активных примесных уровней, но эти, сравнительно в небольшом количестве носители тока, попадая в ограниченные дрейфовыми барьерами потенциальные ямы (находясь ниже уровня протекания [14]), не участвуют в процессе проводимости.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В высокоомных чистых и слаболегированных атомами гольмия кристаллах моноселенида индия для полного объяснения механизма ИПФ, помимо наличия уровней прилипания в запрещенной зоне, необходимо учесть также значительную роль флуктуации потенциала свободных энергетических зон, возникших вследствие частичной неупорядоченности этого материала.

1. F.N.Kaziyev, M.K.Seinkman, J.B.Ermolovich, G.A.Akhundov, *On photoconductivity of n-InSe single crystals*, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **31** (1969) 59-61.
2. А.Ш.Абдинов, А.Г.Кязым-заде, *Явления фото- и электропамяти в высокоомных монокристаллах n-InSe*, *Физ. и техн. полупроводников*, **9** (1975) 1690-1693.
3. А.Ш.Абдинов, П.Г.Аббасова, Я.Г.Гасанов, *Эффект фотоэлектрической утомляемости в монокристаллах селенида индия*, *Физ. и техн. полупроводников*, **17** (1983) 761.
4. С.М.Рывкин, *Фотоэлектрические явления в полупроводниках*, М.: Наука, (1963) 494.
5. А.Ш.Абдинов, А.А.Ахмедов, Я.Г.Гасанов, А.З.Магомедов, *Индукцированная собственной подсветкой примесная фотопроводимость в монокристаллах селенида индия, со свойством остаточной фотопроводимости*, *Физ. и техн. полупроводников*, **15** (1981) 1255-1258.
6. А.Ш.Абдинов, Я.Г.Гасанов, *Электроиндуцированная примесная фотопроводимость в монокристаллах InSe со стимулированной фотопроводимостью и остаточной проводимостью*. *Физ. и техн. полупроводников*, **16** (1982) 769-772.
7. А.Ш.Абдинов, Р.Ф.Бабаева, Р.М.Рзаев, Г.Х.Эйвазова, *Влияние легирования редкоземельными элементами на исходную и сенсibilизированную ИК-фоточувствительность слоистых кристаллов селенида индия*, *Прикладная физика*, № 2 (2006) 62-66.
8. А.М.Гусейнов, Т.И.Садыхов, *Получение легированных редкоземельными элементами монокристаллов селенида индия*, В сб.: *Электрофизические свойства полупроводников и плазмы газового разряда*, Баку, АГУ, (1989) 42-44.
9. М.Ламперт, П.Марк, *Инжекционные токи в твердых телах*, М. Изд. «Мир», (1973) 416.
10. А.Ш.Абдинов, Р.Ф.Бабаева, *Эффект переключения в слоистых моноселенидах $A^{III}B^{VI}$ и гетероструктурах на их основе*, *Вестник Бакинского Университета, сер. физ.-мат.наук*, №3 (2009) 139-147.
11. А.Ш.Абдинов, Р.Ф.Бабаева, *Долговременная изотермическая релаксация темнового электросопротивления монокристаллов селенида индия, легированного диспрозием*. *Неорганические материалы*, **31** (1995) 1020-1022

12. М.К.Шейнкман, А.Я.Шик, *Долговременные релаксации и остаточная проводимость в полупроводниках*, Физ. и техн. полупроводников, **10** (1976), 209-232
13. Р.Ф.Бабаева, *Особенности электронных явлений в частично-неупорядоченных полупроводниках типа легированных редкоземельными элементами кристаллов $A^{III}B^{VI}$ со слоистой структурой и гетероструктурах на их основе*, Автореф. докт. дисс., Баку, 2009, 38.
14. В.Б.Сондамирский, А.Г.Ждан, М.А.Месерер, И.Б.Гуляев, *Механизм замороженной (остаточной) проводимости полупроводников*, Физ. и техн. полупроводников, **7** (1973) 1314-1321

İNDIUM MONOSELENİDİ KRİSTALLARINDA İNDUKSİYALANMIŞ AŞQAR FOTOKEÇİRİCİLİYİN XÜSUSİYYƏTLƏRİ

Ə.Ş.ABDINOV, R.F.BABAYEVA, R.M.RZAYEV

Təqdim olunan işdə təmiz (aşqarlanmamış) və müxtəlif tərkibdə holmium atomları ilə aşqarlanmış indium monoselenidi kristallarında induksiyaalanmış aşqar fotokeçiriciliyin (İAF) xüsusiyyətlərinə baxılmışdır.

Müəyyən olunmuşdur ki, yüksəkomlu təmiz və holmium atomları ilə zəif aşqarlanmış indium monoselenidi kristallarında İAF-ın baş vermə mexanizmini tam izah etmək üçün, həmin materialın qadağan olunmuş zonasında tutma mərkəzləri ilə yanaşı, qismən nizamsızlıq hesabına sərbəst enerji zonalarının potensialının əhəmiyyətli dərəcədə flüktuasiyasının mövcudluğunu da nəzərə almaq lazımdır.

FEATURES OF INDUCED IMPURITY PHOTOCONDUCTIVITY IN CRYSTALS OF INDIUM MONOSELENIDES

A.SH.ABDINOV, R.F.BABAYEVA, R.M.RZAYEV

The features of the induced impurity photoconductivity in pure and doped with different content of atoms of holmium single crystals of indium selenide have been discussed.

It has been established that in high-pure and lightly doped holmium atoms, crystals of indium selenide single crystals for a full explanation of the mechanism of IAP, in addition to the availability levels of the adhesion in the gap, it must also has been considered the significant role of the fluctuations of free potential energy bands, arising from a partial disorder of this material.

Редактор: С.Мехтиева

УДК 621.383

**ФОТОДИОДЫ НА ОСНОВЕ $Cd_xHg_{1-x}Te$, ПОЛУЧЕННЫЕ ОБЛУЧЕНИЕМ
ИОНАМИ ИНДИЯ С ЭНЕРГИЕЙ 5 кэВ**

**Н.Д.ИСМАЙЛОВ, Э.К.ГУСЕЙНОВ, И.С.ГАСАНОВ, Ш.М.КУЛИЕВ,
Р.МУХТАРОВА**

*Институт физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г. Баку, ул. Г.Джавида, 33
ilkhamg@mail.ru*

РЕФЕРАТ	
Приведены результаты экспериментального исследования свойств фотодиодных структур на основе $Cd_xHg_{1-x}Te$ ($0,2 < x < 0,3$), впервые изготовленных методом обработки поверхности материала р-типа ионами индия с энергией 5кэВ. На основе анализа электрических и фотоэлектрических свойств полученных структур сделан вывод о высоком качестве структур, полученных при обработке ионами индия. Сделано предположение, что это связано с электрической активацией атомов индия и с сравнительно меньшими дозами облучения ионами индия, необходимыми для формирования инверсного слоя.	
поступила 12.02.2011 принята к печати 18.06.2011	
Ключевые слова: фотодиоды, ИК-оптоэлектроника, р-п переходы	

В настоящее время узкозонные материалы $Cd_xHg_{1-x}Te$ сохраняют свое лидирующее место в ИК-оптоэлектронике, несмотря на технологическую сложность и высокую цену этого материала. Это связано как с постоянным спросом на этот материал для военных и коммерческих применений, так и с уникальными свойствами КРТ, позволяющими использовать структуры на квантовых ямах на его основе для изучения физических эффектов и явлений, таких как квантовый эффект Холла, спин-орбитальное расщепления и т.п. [1,2]. Основное развитие ИК-фотоприемников происходит в направлении создания большеформатных фотодиодных матриц [1]. В большинстве случаев формируют фотодиоды n^+ -р-типа с использованием ионной имплантации элементов Hg, В, Н, Ве, Al, In, Ag с энергией $30 \div 200$ кэВ и дозами $10^{12} \div 10^{15} \text{ см}^{-2}$ в вакансионно-легированный материал [2,3]. При этом p - n -переход формируется на глубине $1 \div 3$ мкм, которая значительно превышает субмикронную область имплантированных ионов, а уровень легирования инверсного n^+ слоя намного выше, чем доза имплантации. Это обусловлено тем, что ионы высокой энергии высвобождают в приповерхностной области в большом количестве слабосвязанные атомы ртути, которые, диффундируя в объем, формируют n^+ слой. Необходимости в посимплантационном отжиге не появляется, особенно при малых дозах облучения, хотя в некоторых случаях при имплантации донорных примесей указывается на улучшение параметров перехода [4].

Метод низкоэнергетичной ионной обработки (НАО), широко используемый в технологии изготовления ИК-фотоприемников, выступает в качестве альтернативы традиционной ионной имплантации для изготовления р-п переходов на основе $Cd_xHg_{1-x}Te$ [5]. Процесс обработки проводится ионами инертных газов энергией $100 \div 1500$ эВ. Глубина залегания р-п-перехода зависит от исходных параметров материала (состава x , исходной концентрации вакансий или примесей) и параметров процесса НАО, поэтому режим обработки необходимо подбирать для каждого конкретного случая. При одинаковых параметрах подложки для получения глубины залегания перехода в несколько микрон необходимая доза ионов при НАО на несколько порядков превышает их значения при ионной

имплантации. При этом происходят распыление и удаление части верхних слоев. Вопрос формирования инверсного слоя в p -типе $Cd_xHg_{1-x}Te$ как при НИО, так и при ионной имплантации остается еще предметом обсуждений.

В этом смысле представляет определенный интерес исследование свойств инверсного слоя, полученного обработкой поверхности p - $Cd_xHg_{1-x}Te$ низкоэнергетичными ионами ($E < 30$ кэВ) донорных примесей.

В данной работе приводятся результаты экспериментального исследования свойств фотодиодных структур, полученных обработкой поверхности p - $Cd_xHg_{1-x}Te$ ионами индия энергией ~ 5 кэВ.

Для изготовления фотодиодных структур использовались объемные монокристаллы p - $Cd_xHg_{1-x}Te$ составов $x=0,19 \div 0,2$ и $x=0,27 \div 0,3$ как вакансионно-легированные, так и легированные медью и серебром, с концентрацией дырок $p=10^{15} \div 5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$ и подвижностями $\mu_p=400 \div 700 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ при 77К. Планарные фотодиоды площадью $S_1=3.2 \cdot 10^{-5} \text{ см}^2$ формировали методом фотолитографии. Для получения инверсного слоя образцы подвергали облучению пучком нейтрализованных ионов индия с энергиями 5 кэВ при плотности тока 4 мкА/см^2 на вакуумной установке с жидкометаллическим источником ионов. Для сравнения инверсные слои были получены также методом НИО ионами аргона с энергией 250 эВ при плотности тока $0,3 \text{ мА/см}^2$ и ионами бора с энергией 150 кэВ и дозой $3 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$. В случае НИО доза облучения варьировалась в зависимости от исходных параметров материала. В качестве пассивирующего покрытия использовались термически напыленные слои ZnS толщиной 0,3 мкм. Во всех случаях процесс отжига не проводился.

Качество перехода и механизм прохождения тока в полученных структурах определялись по измерениям температурной зависимости ВАХ в интервале $T=77 \div 300 \text{ К}$, а также параметров фоточувствительности и их спектральных зависимостей. Анализ температурных зависимостей ВАХ показывает, что основными механизмами, определяющими ток в полученных структурах являются: для $x > 0,2$ при $T \geq 90 \text{ К}$ и для $x \leq 0,28$ при $T > 110 \text{ К}$ термоактивационные механизмы, а при $T < 90 \text{ К}$ для $x \approx 0,2$ и при $T < 110 \text{ К}$ для $x \approx 0,28$ — межзонное туннелирование и туннелирование через локальные центры в запрещенной зоне. Лучшими характеристиками обладали p - n переходы, полученные обработкой ионами индия.

На Рис. 1 приведена ВАХ планарного p - n -перехода на основе p - $Cd_xHg_{1-x}Te$ с $x \approx 0,2$ при концентрации дырок $p=3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, полученной обработкой ионами индия дозой $D_I=4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$. Как видно из Рис.1, обратные токи имеют характер насыщения до $U \approx 0,3 \text{ В}$, что указывает на термоактивационный или диффузионный механизм прохождения тока. Величина дифференциального сопротивления $R_d A \geq 100 \text{ Ом/см}^2$ до $U \approx 0,2 \text{ В}$, что сравнимо с наилучшими результатами на объемных монокристаллах.

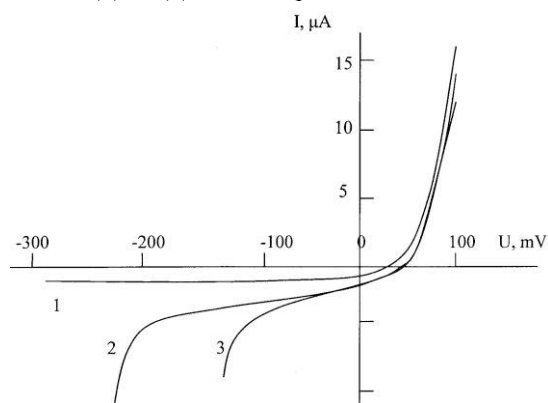


Рис. 1.

ВАХ фотодиодов на основе p - $Cd_{0,2}Hg_{0,72}Te$ при 77К, полученных НИО ионами индия (1), ионами аргона (2) и имплантацией ионами B^+ (3).

Для сравнения приведены также ВАХ для структур, полученных НИО ионами аргона и имплантацией ионов бора. Следует отметить, что формирование инверсного слоя наблюдается при НИО ионами индия при дозах на два порядка больших, чем при имплантации ионов B^+ , и на три порядка меньших, чем при НИО ионами аргона. Так, например, для $x \approx 0,2$ и $p=3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ необходимая доза ионов

аргона $D_A=3 \cdot 10^{16} \text{см}^{-2}$, а ионами индия — $D_I=4 \cdot 10^{14} \text{см}^{-2}$; при $p=2 \cdot 10^{16} \text{см}^{-2}$, $D_A=2 \cdot 10^{17} \text{см}^{-2}$, $D_I=3 \cdot 10^{15} \text{см}^{-2}$. Для $x \approx 0,28$ эти величины имели в несколько раз большие значения. Как известно, при НИО, на самом деле, образуется не n^+-p , а n^+-n-p тип перехода, причем переход расположен в области n с концентрацией носителей заряда на порядок меньшей, чем в исходном образце до обработки. Об этом свидетельствуют значения концентраций, полученных из C-V измерений.

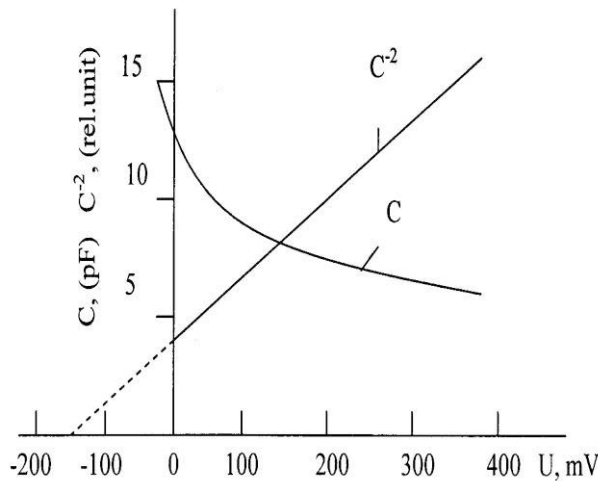


Рис.2.

Емкостные характеристики фотодиодных структур на основе $p\text{-Cd}_{0.28}\text{Hg}_{0.72}\text{Te}$ с $N_A-N_D=10^{16} \text{см}^{-3}$ при $T=77\text{K}$.

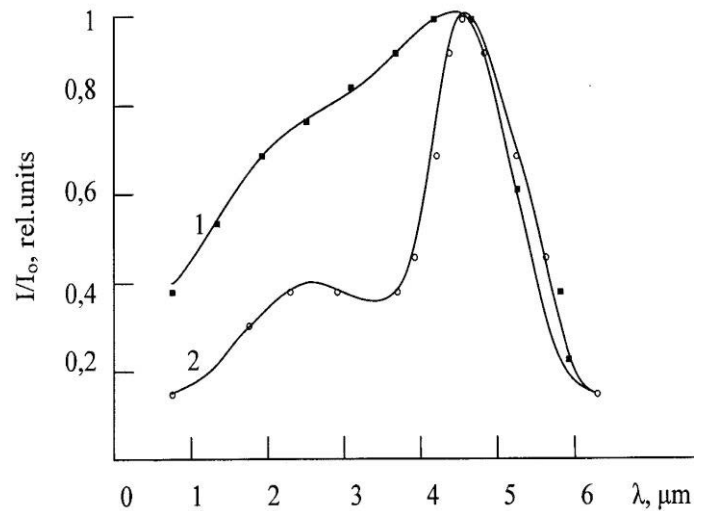


Рис.3.

Спектральная характеристика фоточувствительности фотодиодных структур на основе $p\text{-Cd}_{0.2}\text{Hg}_{0.72}\text{Te}$ при 77K до (1) и после (2) химического травления.

На Рис.2 приведена емкостная характеристика для $x \approx 0,28$ с $N_A-N_D=10^{16} \text{см}^{-3}$ в исходной подложке, характеристика $C^2(U)$ — прямая, указывающая на ступенчатый характер распределения примесей. Величина отсечки на оси абсцисс дает значение высоты диффузионного барьера $U_b=130\text{мВ}$, совпадающее со значениями, полученными из ВАХ и с величиной фото-ЭДС насыщения. С использованием данных измерений рассчитана величина концентрации $N_A-N_D=10^{16} \text{см}^{-3}$ в p -слое. Верхний n^+ -слой характеризуется большой степенью радиационных нарушений и скоростью поверхностной рекомбинации, что может существенно влиять на фотоэлектрические характеристики прибора, если его толщина более 3мкм.

На Рис.3 приведена спектральная характеристика фотодиода для $x \approx 0,28$ до и после химического травливания слоя толщиной 3÷4мкм. До травления спектральная характеристика имела спад в коротковолновой области спектра; после травления фоточувствительность возросла более чем в 2 раза, а спектральная характеристика в коротковолновой области увеличилась на 40%. При этом емкостная характеристика не изменилась. Это объясняется удалением при химическом травлении радиационно-нарушенного n^+ -слоя с повышенной скоростью поверхностной рекомбинации, где погибает значительная часть фотогенерированных носителей заряда.

Надо отметить, что на сегодняшний день индий является наиболее изученной и широко применяемой донорной примесью для $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$. В диапазоне концентраций $10^{15} \div 10^{17} \text{см}^{-3}$ все введенные в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ атомы индия, как правило, оказываются на 100% электрически активными и являются однозарядными донорами как примесь замещения в подрешетке катиона [6]. Анализ полученных результатов позволяет сделать предположение, что значительное уменьшение энергии ионов индия, который является донорной примесью в $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$,

позволяет существенно снизить степень радиационной нарушенности поверхностных слоев по сравнению с имплантацией ионами высоких энергий (100÷200кэВ). Значительно меньшая степень нарушенности кристаллической решетки, возможно, создает условия для электрической активации атомов индия, что позволяет для получения инверсного слоя на три порядка снизить дозу облучения по сравнению с НИО ионами аргона, при которых происходит распыление и удаление верхних слоев. Иначе говоря, если при ионной имплантации и при обработке ионами аргона инверсный слой формируется за счет быстрой диффузии по междоузельному механизму высвободившихся атомов ртути, то в случае с обработкой ионами индия он формируется также или в основном за счет электрической активации донорных атомов индия.

Таким образом, использование для изготовления фотодиодов на основе $\text{p-Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ обработки поверхности ионами индия с энергией $\sim 5\text{кэВ}$ позволяет значительно облегчить технологию получения качественных ИК-фотодиодов.

1. A.M.Filachev, Ponomarenko V. P., Taubkin I. I., Ushakova M. B. Infrared focal plane arrays: state of the art and development trends, *Proceeding of SPIE*, № 5126 (2003) 52-85.
2. P.G.Pitcher, Pl.F.Hemmet, Q.V.Davis, *Formation of shallow photodiodes by implantation of boron into mercury cadmium telluride*, *Electron. Let.*, **18** (1980) 1090-1092.
3. L.J.Kozlowski, R.B.Bailey, S.C.Cabelli, D.E.Cooper, G.Mc.Comas, K.Vural, W.E.Tennant, *640x480 PACE $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ FPA*, *Proceeding SPIE*, №1735 (1992) 163-174.
4. М.Г.Андрюхив, С.В.Белотелое, И.С.Вирт, П.С.Шкумбатюк, *Шум дефектов обратносмещенных n^+ -р-переходов на основе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$* , *ФТП*, **26** (1992) 393-394.
5. К.Р.Мынбаев, В.И.Иванов-Омский, *Модифицирование свойств $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ низкоэнергетическими ионами*, *ФТП*, **37** (2003) 1153-1178.
6. H.R.Vydyanath, *The doping of HgCdTe epitaxial layers with In*, *J. Cryst. Growth.*, **161** (1996) 64-69.

5keV ENERJILI INDIUM IONLARI ILƏ ŞUALANDIRILMIŞ $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ƏSASINDA FOTODIODLAR

N.D.İSMAYILOV, E.K.HÜSEYNOV, İ.S.HƏSƏNOV, S.M.GULIYEV, R.MUXTAROVA

İlk dəfə olaraq p-tipli materialın səthinin 5 keV enerjili indium ion şualandırılması ilə alınmış $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ($0,2 < x < 0,3$) əsasında fotodiodların xassələri eksperimental tədqiq olunmuşdur. Alınmış strukturların elektrik və fotoelektrik xassələrinin təhlili əsasında onların yüksək keyfiyyətə malik olması müəyyən edilmişdir. Fərz edilir ki, bu, indium atomlarının elektrik aktivləşməsi ilə və invers təbəqəsinin formalaşması üçün zəruri olan indium ionlarının şualanma dozasının nisbətən aşağı olması ilə əlaqədardır.

PHOTODIODES ON THE BASIS OF $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ OBTAINED BY IRRADIATION OF 5KeV INDIUM IONS

N.D.İSMAYILOV, E.K.GUSEYINOV, İ.S.GASANOV, S.M.GULIYEV, R.MUKHTAROVA

Results of an experimental research of properties of photodiode structures on the $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ basis ($0.2 < x < 0.3$) have been made by treatment of a surface of p-type material by 5keV ions of indium have been presented. By analysis of electric and photoelectric properties of obtained structures it has been drawn a conclusion about higher quality of the structures fabricated by indium ion treatment. It has been expected that it has been related with electric activity of In atoms and with relatively low irradiation doses for inverse layer formation.

Редактор: Б.Бархалов

Pacs 548.1.61.66

SYNTHESIS, STRUCTURE INVESTIGATION AND OPTICAL PROPERTIES OF $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ COMPOUND

**J. HASANI BARBARAN², G.G.GUSEINOV¹, Y.I.ALIYEV¹,
G.M.AGAMIRZEYEVA¹**

Institute of Physics, National Academy of Sciences¹

AZ 1143, Baku, Husein Javid ave., 33

Solid State Lasers Research Department, Laser and Optic Research Institute²

P.O.Box.14155-1339, Tehran, Iran

g.guseinov@rambler.ru

received: 11.03.2011

accepted: 04.06.2011

Key words: semiconductor, single crystal,
crystal structure, optical absorption

ABSTRACT

$\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ solid solution has been synthesized. Different characterization methods such as XRD, SEM and EDS were used to study the compound of prepared sample. The unit cell parameters of the hexagonal lattice are: $a=3.7813\text{\AA}$, $c=12.1888\text{\AA}$, $V=151.04\text{\AA}^3$, $\rho_{\text{XRD}}=3.84\text{g/cm}^3$, sp.gr. $P3m1$, $Z=1.33$. The optical absorption edge is measured and established that optical transitions of $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ are direct and characterized by energy about $\sim 1.47\text{eV}$.

INTRODUCTION

The phase diagram of quasi-binary section $\text{Ga}_2\text{S}_3\text{-In}_2\text{S}_3$ was investigated by the authors of [1-2], who had found that in this system only one compound of GaInS_3 was produced, where the cell constants of the hexagonal lattice are $a=3.810\text{\AA}$, $c=17.241\text{\AA}$, sp.gr. $P3m1$, $Z=2$. The authors of [3-8] investigated into the phase formation in the above mentioned section by X-ray diffraction methods through changing In/Ga ratio. For this purpose a number of single crystals with general formula of $(\text{Ga},\text{In})_2\text{S}_3$ were grown and crystal structures of all obtained crystals were determined [3-8]. In order to grow these single crystals, preliminarily synthesized powder crystals of the following compositions were used: GaInS_3 , $\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{1.25}\text{S}_3$ and $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$. The temperature ranges of the grown were:

GaInS_3 $T_1=973\text{ K}$, $T_2=873\text{ K}$;

$\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{1.25}\text{S}_3$ $T_1=1073\text{ K}$, $T_2=973\text{ K}$;

$\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ $T_1=1173\text{ K}$, $T_2=1073\text{ K}$;

A number of single crystals were obtained by CVD (Chemical Vapor Deposition) and analyzed by detailed X-ray analysis. These single crystals were tested by X-ray Laue, rotation and precession methods, also determined the crystal structure for most of them. Particularly the following results were obtained:

- Volumetric lamellar slightly yellow crystals, obtained from the compositions of GaInS_3 and $\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{1.25}\text{S}_3$, were crystallized in the hexagonal system with the lattice parameters of $a=6.53\text{\AA}$ and $c=17.90\text{\AA}$ [3].
- The red colored layered single crystals grown at temperature range of $T_1=1073\text{ K}$ and $T_2=973\text{ K}$ belong to the hexagonal system with the lattice parameters of $a=3.80\text{\AA}$ and $c=30.50\text{\AA}$ [4]. Among the red crystals were observed slight grayish layer single crystals of triangular shapes. These crystals belong to polytypical form of GaInS_3 with the unit cell constants of $a=3.80\text{\AA}$ and $c=45.90\text{\AA}$ [5].
- The layered yellow crystals obtained from the $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ composition in the temperature ranges of $T_1=973\text{ K}$ and $T_2=873\text{ K}$, are orthorhombic with the lattice parameters of $a=19.11\text{\AA}$, $b=6.20\text{\AA}$ and $c=3.81\text{\AA}$ [6].

- The oval-shaped layered, yellow crystals obtained from the $\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{1.25}\text{S}_3$ composition in the temperature ranges of $T_1=1173\text{K}$ and $T_2=1073\text{K}$, have hexagonal structure and are crystallized in two polytypical forms. Their cell parameters are $a=3.81\text{\AA}$, $c=18.20\text{\AA}$ and $a=3.81\text{\AA}$, $c=54.92\text{\AA}$, respectively [7].
- The layered blackish crystals obtained from the $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3=\text{GaIn}_3\text{S}_6$ and $\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{1.25}\text{S}_3$ compositions at $T_1=1073\text{K}$ and $T_2=973\text{K}$ are hexagonal with $a=3.8\text{\AA}$ and $c=21.1\text{\AA}$ lattice parameters [8].
- The octahedron-shaped crystals were grown at high temperatures and belong to cubic spinel with $a=10.61\text{\AA}$ [7].

The present research is dedicated to refinement of the structure and measurement of the optical absorption edge of the solid solution $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$, obtained through partial substitution the atoms In and Ga with Fe in the hexagonal structure of GaInS_3 .

SYNTHESIS OF THE $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ COMPOUND

The $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ was synthesized through the direct fusion of the initial elements with stoichiometric ratio. The elements purity was no less than 99.998%. Iron was preliminarily purified from the oxide layer by hydrogen passing in a temperature range of $820\div 880\text{K}$. The necessary amounts of elements were placed into the glass-carbonic Su-2500 crucibles and then in quartz tubes. Synthesis in the glass-carbonic crucibles prevents the interaction between metal compound and quartz, which may contaminate the synthesized material by oxides. Then the preliminarily evacuated ampoules were filled with argon gas and evacuation was done again to achieve a residual pressure of 10^{-4}Torr . The $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ solid solution was obtained by heating the ampoule content in inclined furnace at $1250\div 1275\text{K}$ for $2.0\div 2.5\text{hrs}$. Then the melted mass was cooled down to 973K and kept at this temperature for improving the product quality for 15 days. The method in detail has been described by Memo [9].

SEM IMAGE AND EDS ANALYSIS

The elemental analysis of the synthesized compound $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ was performed by EDS XGT-7000 (Fig.1), which shown that the composition consists all of four elements (Ga, In, Fe, S). The photo of the layer shaped of $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ compound are shown in Fig.2. The images of the two pieces of the $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$, obtained by variable pressure scanning electron microscope LEO 1455VP (Fig.3), clearly shown the layered single crystal nature of them.

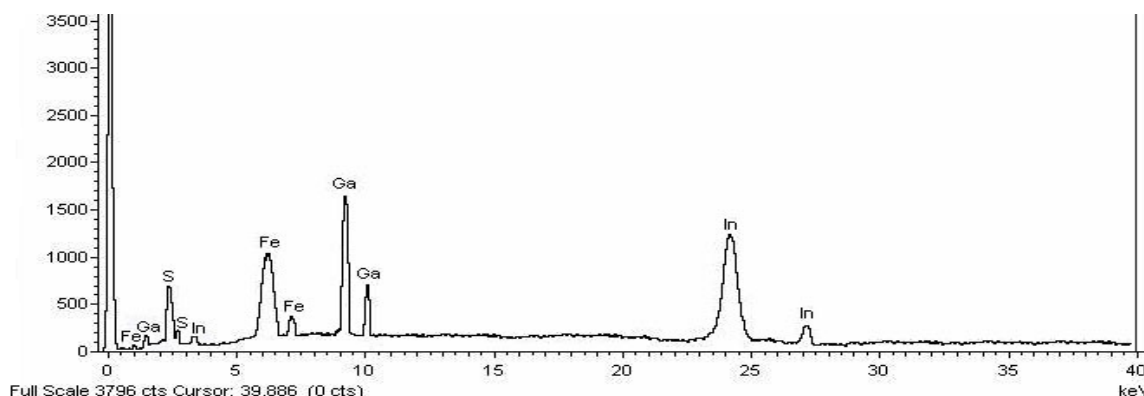


Fig. 1.

The EDS image of the $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$.



Fig.2.
Photo of layered crystals
 $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$.

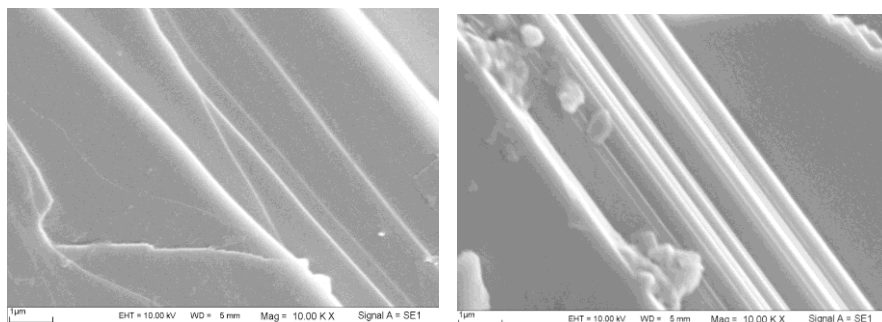


Fig.3.
SEM images of the $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$.

THE STRUCTURE INVESTIGATION

The structural analysis was carried out by the X-ray powder diffractometer (D8 ADVANCE, $\text{CuK}\alpha$ -radiation, $\lambda=1.5406\text{\AA}$, mode-40 kV, 40mA, $0.5^\circ < 2\theta < 80^\circ$, $T=300\text{K}$). The experimental data processing was done by the EVA and TOPAS softwares. Comparison the diffraction data of this compound with appropriate data of the polymorphic and polytypical forms of $\text{Ga}_2\text{S}_3\text{-In}_2\text{S}_3$ system showed that they are completely similar with the crystals synthesized from the $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ gas phase [10]. Table I presents the X-ray diffraction data (Fig.4) indexed by TOPAS software.

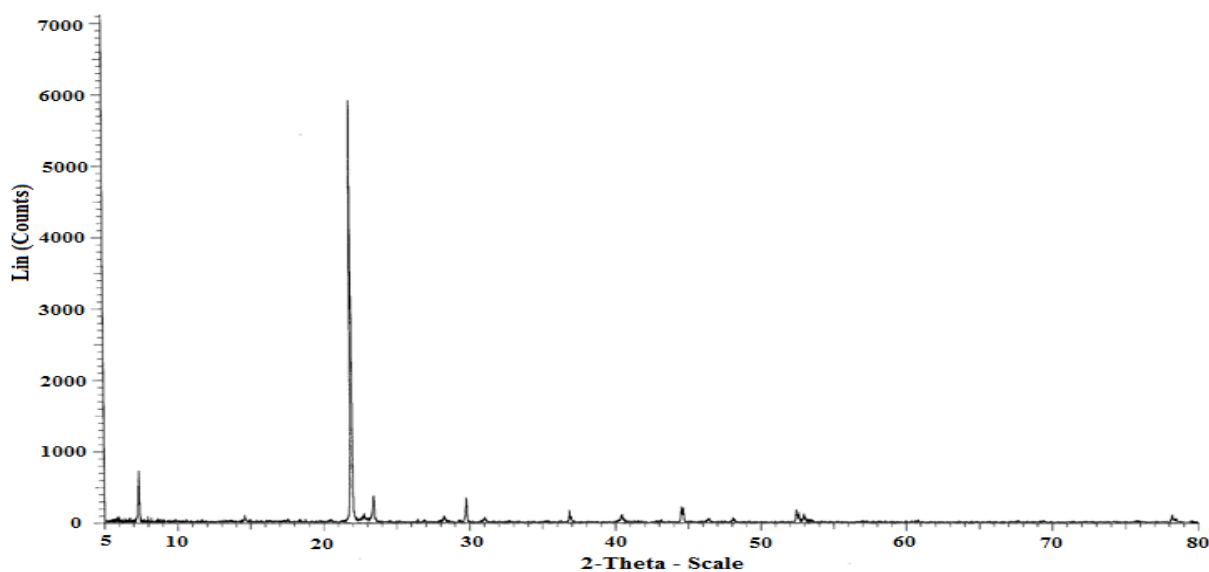


Fig.4.
X-ray diffraction for $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$.

The process of indexing showed that the studied phase was crystallized in the hexagonal system with the lattice constants of $a=3.7813\text{\AA}$, $c=12.1888\text{\AA}$, $V=151.04\text{\AA}^3$, $\rho_{\text{XRD}}=3.84\text{g/cm}^3$, *sp. gr.* P3m1, $Z=1.33$. As mentioned above, one of polytypes of $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ was characterized by similar crystallographic data. The differences between these crystals and those obtained in the present research are due to the presence or absence of the inversion symmetry: the structure in the first crystal is symmetrical but the studied crystals of $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ have no such symmetry. According to the atomic positions of $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$ crystal, the atomic positions of $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ were defined easily. In this case, the main issue was finding the position of the Fe atoms. It is important to know that in such layered structures, the octahedral voids are always filled with In atoms. Hence, it appears that the atoms of iron must be statically located in the

tetrahedral positions of In or Ga atoms. Among the two possible tetrahedral positions for distribution of Fe atoms, the best result was obtained in the version, which is shown in Fig.5.

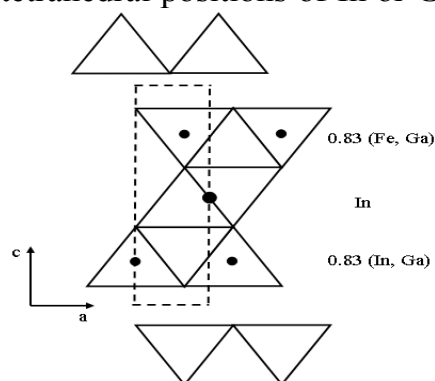


Fig.5.
The projection of $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ crystal structure on the (010) Plane.

Table 1.

X-ray diffraction data for $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$.

No	2θ	d_{exp}	I/I_0	h	k	l
1	7.247	12.1888	577	0	0	1
2	14.523	6.0944	50.6	0	0	2
3	21.858	4.0629	5929	0	0	3
4	23.334	3.8091	402	1	0	2
5	28.195	3.1625	83.8	1	0	1
6	29.753	3.0004	412	0	1	3
7	29.285	3.0472	9.7	0	0	4
8	30.976	2.8846	54.5	1	0	2
9	36.841	2.4377	107	0	0	5
10	40.401	2.2307	101	1	0	4
11	44.566	2.0314	132	0	0	6
12	46.398	1.9554	36.9	1	0	5
13	48.087	1.8906	64.8	1	1	0
14	48.699	1.8683	10	1	1	1
15	52.512	1.7412	94.2	0	0	7
16	53.003	1.7262	69.9	1	0	6
17	53.408	1.7141	9.48	1	1	3
18	56.128	1.6373	3.39	2	0	0
19	56.677	1.6227	8.66	2	0	1
20	58.305	1.5812	7.77	2	0	2
21	60.137	1.5374	4.54	1	0	7
22	60.74	1.5236	16.7	0	0	8
23	62.075	1.4939	2.46	1	1	5
24	67.639	1.3839	4.75	1	1	6
25	67.783	1.3814	3.84	1	0	8
26	69.044	1.3592	6.8	2	0	5
27	69.33	1.3543	3.77	0	0	9
28	73.943	1.2808	6.14	1	1	7
29	74.349	1.2748	5.24	2	0	6
30	75.976	1.2515	14.3	1	0	9
31	76.977	1.2377	12.3	2	1	0
32	78.392	1.2188	43.1	0	0	10
33	78.849	1.2129	4.27	2	1	2

Thus this structure is similar with $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{1.5}\text{S}_3$, which refers to the structural type ZnIn_2S_4 [11]. The structure was refined in the isotropic approximation to $R=0.070$. The final atomic coordinates are given in Table II.

Interatomic distances are $\text{S-S}=3.70\text{\AA}$, $\text{In-S}=2.60\text{\AA}$ (in octahedron), $(\text{Ga,Fe})\text{-S}=2.30\div 2.34\text{\AA}$; $(\text{In, Ga})\text{-S}=2.34\div 2.36\text{\AA}$. Since the package involved four layers of S atoms, the structural formula for one package corresponds to $\text{Ga}_{1.11}\text{In}_{1.11}\text{Fe}_{0.44}\text{S}_4$.

Table 2.

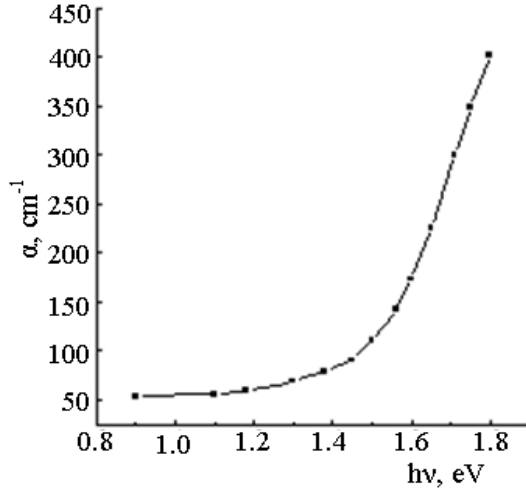
Atomic coordinates and isotropic temperature displacement factors of $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$.

Atom	x	Y	Z	B_i
In	0	0	0.5000	2.533
(Ga, In)	2/3	1/3	0.8100	1.820
(Ga, Fe)	1/3	2/3	0.1900	1.679
S_1	2/3	1/3	0.6126	1.721
S_2	1/3	2/3	0.3874	2.653
S_3	1/3	2/3	0.8757	1.574
S_4	2/3	1/3	0.1243	1.721

OPTICAL ABSORPTION EDGE OF $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$

In order to determine the energy-band gap and the nature of the optical transitions of $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$, its optical absorption spectrum was measured. The measurements were carried out on the samples with $\sim 40\mu\text{m}$ thickness by spectrophotometer SF-26 at 300K. The absorption coefficient α is calculated according to the following formula:

$$I = I_0 e^{-\alpha d}, \quad (1)$$



where I_0 is the intensity of incident radiation, I is the intensity of transmitted radiation, d =sample thickness and α is the absorption coefficient.

As shown in Fig.6, in the range of $0.9\div 1.4\text{eV}$ energy, the absorption coefficient depends weakly on the photon energy of the incident radiation. In the range of $1.4\div 1.8\text{eV}$, the absorption coefficient changed from 50cm^{-1} to 450cm^{-1} .

Fig.6.

The dependence of the absorption coefficient on the photon energy of the incident radiation in the $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ sample.

Due to absence the energy-band structure for $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$, it was impossible to conclude that in which point of the Brillouin zone were localized the smallest optical transitions. However, on the base of dependence of absorption coefficient from incident radiation energy, we can make qualitative conclusions about the nature of the optical transitions and the minimal values of the optical band gap. It is clear that to determine the nature of optical transitions the steepness of the absorption edge is important. As it is mentioned in above in the range of $1.4\div 1.8\text{eV}$ the steepness of the edge ($d\ln\alpha/dh\nu$) is about $27\text{-}28\text{ eV}^{-1}$. These values of the steepness of the optical absorption edge are also characteristic for the semiconductor compounds with direct optical transitions. For example, for CdGa_2Se_4 and ZnGa_2Se_4 the steepness of the absorption edge is about 20eV^{-1} , which is well consistent with the data in reference [12]. Therefore, the optical transitions in $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ are direct and characterized with energy gap of $\sim 1.47\text{eV}$. Comparison the ϵ_g of this semiconductor and for other modifications [13], shown that for investigated material the energy gap is lower about 1eV . So the particularly replacement of the tetrahedral coordinated elements (In, Ga) with 3d elements (Fe) decreases the

value of ε_g , which is necessary for effective application of such materials in semiconductor technology.

CONCLUSIONS

$\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ solid solution was synthesized, its structure was analyzed by X-ray diffraction method and its crystal class was identified as trigonal with: $a=3.7813\text{\AA}$, $c=12.1888\text{\AA}$, $V=151.04\text{\AA}^3$, $\rho_{\text{XRD}}=3.84\text{g/cm}^3$, *sp. gr.* P3m1, $Z=1.33$. The absorption coefficient of these semiconductors was obtained and it was established that their optical transitions are direct and the energy gap characterized with 1.47eV .

1. M.İ.Zargarova, R.S.Gamidov, *İzv. AN. USSR., Triple indium gallium sulfide, Non-org. mater.*, **5** №5 (1969) 371-373.
2. V.P.Ambros, I.Y.Andronik, V.P.Mushinskiy, *Some physico-chemical properties of crystals of ternary systems Ga-In-Se and Ga-In-S. Some questions in chemistry and physics of semiconductor complex composition*, (Ujgorod: Publishing house UGU.), (1970) 238-239.
3. G.G.Guseinov, M.G.Kazimov, A.S.Guliyev, *The crystal structure of GaInS₃*, *Rep. of Azerb. SSR AS*, **44** (1990) 26-27.
4. I.R.Amiraslanov, Yu.G.Asadov, R.B.Veliyev, A.A.Musaev, G.G.Guseynov, *Structure and intercalation twopaktnogo polytypic GaInS₃ (b, II)*, *Crstallogr. Rep.*, **35** (1990) 1298-1299.
5. I.R.Amiraslanov, G.G.Guseynov, H.S.Mamedov, *The crystal structure of polytype trehnaketnogo GaInS₃ (III)*, *Crstallogr. Rep.*, **33** (1988) 767-768.
6. G.G.Guseinov, I.R.Amiraslanov, H.S.Mamedov, A.S.Guliyev, *The crystal structure of orthorhombic GaInS₃*, *Crstallogr. Rep.*, **32** (1987) 243-244.
7. I.R.Amiraslanov, T.X.Azizov, G.G.Guseinov, A.S.Kuliyev, G.M.Niftiyev, *Neorg. Single-crystal growth, structure and crystal chemistry of polymorph modifications GaInS₃*, *Azerb. IPAS Baku*, №185 (1986) 6-37.
8. I.R.Amiraslanov, F.Y.Asadov, G.G.Guseinov, *The crystal structure of new layer semiconductor Ga_{0.74}In_{2.92}S₇*, *Crstallogr. Rep.*, **34** (1989) 1012-1014.
9. A.Memo, H.Haeuseler, *A new layered chalcogenides in the system NiIn₂S₄-NiIn₂Se₄*, *Z.Naturforsch.*, **57 b** (2002) 509-511.
10. I.R.Amiraslanov, R.B.Veliyev, A.A.Musaev, *On the Phase Formation in the Ga₂-S₃-In₂S₃ and crystal structure Ga_{0.5}In_{1.5}S₃*, *DAS Acad. Sci. of Azerb.*, **46** №1 (1990) 33-36.
11. F.G.Donika, S.I.Radautsan, G.A.Kiosse, *The crystal structure of polytype twopaktnogo ZnIn₂S₄ (II)a refinement of the structure and threepaketnogo polytype ZnIn₂S₄ (II)a*, *Crstallogr. Rep.*, **16** №1 (1971) 235-237.
12. A.Shileika, *Energy band structure and modulation spectra of A²B⁴C₂⁵ semiconductors*, *Surf. Sci.*, **37** (1973) 730-747.
13. G.G.Guseynov, N.N.Musaeva, M.G.Kayzumov, *The structure and optical absorption kiristalls of Ga_{0.5}Fe_{0.5}InS₃ and Ga_{0.5}Fe_{0.25}In_{1.25}S₃*, *Non-org. mater.*, **39** (2003) 1078-1080.

$\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ BƏRK MƏHLUL KRİSTALLARININ QURULUŞU VƏ OPTİKİ XASSƏLƏRİ

C.HASANİ BARBARAN, Q.H.HÜSEYNOV, Y.İ.ALIYEV, G.M.AĞAMİRZƏYEVA

$\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ tərkibli məhlul sintez edilmişdir. Alınan kristalların bircinsliyi RFA, EDX və SEM üsulları ilə müəyyən edilmişdir. $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ triqonal quruluşda kristallaşır. Onun qəfəs sabitləri $a=3.7813\text{\AA}$, $c=12.1888\text{\AA}$, fə.qr.P3m1, $Z=1.33$, $V=151.04\text{\AA}^3$, $d_{\text{rent}}=3.84\text{q/sm}^3$. Quruluş laylıdır və birpaketli ZnIn_2S_4 -n quruluşu ilə eynidir.

Tədqiq edilən bərk məhlul kristallarının udulma spektrinin sərhəddi ölçülmüş və müəyyən edilmişdir ki, optik keçidlər xəttidir və onun enerjisi $E_g \sim 1.47\text{eV}$ -dur.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$

Дж.ХАСАНИ БАРБАРАН, Г.Г.ГУСЕЙНОВ, Ю.И.АЛЫЕВ, Г.М.АГАМИРЗОВА

Синтезирован твердый раствор состава $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$, однофазность и состав кристаллов установлен методами РФА, EDS и SEM. Показано, что кристаллы $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ кристаллизуются в тригональной структуре с периодами решетки $a=3.7813\text{\AA}$, $c=12.1888\text{\AA}$, пр.гр. $P3m1$, $Z=1.33$, $V=151.04\text{\AA}^3$, $d_{\text{рент}}=3.84\text{г/см}^3$, структура слоистая, однопакетная и изоморфно со структурной $\text{ZnIn}_2\text{S}_4(\text{I})$.

Измерен оптический край поглощения, установлено, что оптический переход является прямым с энергией $\sim 1.47\text{эВ}$.

Редактор: И.Нуриев

UOT 537.311:322

Cu₅SmSe₄ BİRLƏŞMƏSİNDƏ KİNETİK XASSƏLƏRİN XÜSUSİYYƏTİ

R.N.RƏHİMOV, Y.R.ƏLİYEV, Z.İ.SÜLEYMANOV, Q.Q.HÜSEYNOV

Azərbaycan MEA-nın Fizika İnstitutu

AZ 1143, Bakı şəh., H.Cavid pr.33

rashad@physics.ab.az

Daxil olub: 16.05.2011;
Çapa verilib: 05.09.2011

Açar sözlər: Nadir torpaq elementləri, elektrik keçiriciliyi, termoelektrik hərəkət qüvvəsi, Holl əmsali.

REFERAT

Cu₅SmSe₄ birləşməsinin elektrik keçiriciliyi, Holl sabiti və termoelektrik hərəkət qüvvəsi 80÷400K temperatur bölümündə tədqiq olunmuşdur. Kinetik əmsalların temperatur asılılığında müşahidə olunan xüsusiyyətlər müəyyən temperatur bölümündə samariumun valentliyinin dəyişməsi ilə izah olunur.

GİRİŞ

Nadir torpaq elementləri bir sıra xüsusiyyətlərə malik olduğundan, onlar əsasında yaradılan yeni birləşmələr perspektivli materiallar sayılır və onların öyrənilməsi həm elmi cəhətdən, həm də praktiki tətbiq baxımından maraq kəsb edir. Lantanoidlərdə 4f örtüyü boş və ya qismən dolduğundan onlar birləşmələrin tərkibinə ion şəklində daxil olurlar. Lantandan başlayaraq lütensiumadək bu örtük tədricən dolur. Birləşmə yarandığı zaman f təbəqələri bir-birini örtür və 10²²cm³ konsentrasiyadək lokallaşmış səviyyələr yaradırlar. Bu səviyyələr enerjisinə görə yarımkeçiricinin qadağan olunmuş zonasına düşərək “aşqar” səviyyə rolunu oynaya bilər. Standart yarımkeçiricilərdə belə yüksək konsentrasiyalı lokal səviyyələr yaradılması mümkün deyil və məhz bu cəhət tərkibində nadir torpaq elementi olan yarımkeçirici birləşmələrin kinetik və optik xassələrində bir sıra xüsusiyyətlər və onlarda müxtəlif növ faza keçidləri vardır.

Lantanoidlər əsasında Cu-Ln-VI tipli üçqat birləşmələr ilk dəfə P.Rüstəmov və əməkdaşları tərəfindən [1,2] sintez edilmiş və onların strukturu öyrənilmişdir. Qeyd etmək lazımdır ki, müəlliflər Cu₅LnSe₄ birləşməsində samariumdan başqa lantanoidlər sinfinə daxil olan bütün elementlərin hər birinin daxil olduğu birləşmələri öyrənilmişlər. Belə birləşmələrin bəziləri yarımkeçirici, bəziləri metillik və bəziləri hətta ifrat keçiricilik kəsb edir.

Lantanoidlər metal halında və birləşmələrdə üçvalentlilik (Ln³⁺) göstərdikləri halda, onlardan bəziləri anomal valentlilik (Ln²⁺ və ya Ln⁴⁺) göstərir. Bu hal tam dolmuş, boş qalmış, və ya yarımçıq dolmuş 4f-təbəqələrin dayanıqlılığı ilə bağlıdır. İki valentli hal daha çox 4f səviyyəsi yarısınıadək dolmuş olan 4f⁷ konfigurasiyalı Eu²⁺-da və 4f səviyyəsi tam dolmuş olan 4f¹⁴ konfigurasiyalı Yb²⁺-da dayanıqlıdır. Sm-un 4f⁶ konfigurasiyaya malik olduğu ikivalentli halı Eu və Yb nisbətən dayanıqsızdır [3]. Keçirici zonada aktivləşmiş elektronların ekranlaşması nəticəsində samarium atomları valentliyini sıçrayışla ikidən üçə dəyişə bilər. Sm valentliyini dəyişdiyi zaman onun ion radiusu da əhəmiyyətli dərəcədə kiçilir: Sm²⁺ üçün ion radiusu 1.14Å və Sm³⁺ üçün 0.96Å bərabərdir [4]. Ona görə də tərkibində Sm olan birləşmələr qeyri adi xüsusiyyətləri ilə digərlərindən seçilir.

İlk dəfə Maud və b. [5] Ln₂Se₃-Cu₂Se sistemində bəzi tərkibləri sintez edərək onların elektrofiziki və maqnit xassələrini tədqiq etmişlər. Pribilskiy və Həmidov [6] Cu₂Se-Sm₂Se₃ sisteminin faza diaqramını öyrənmiş və bu sistemdə Cu₅SmSe₄, CuSmSe₂ birləşmələrin yarandığını göstərmişlər. Bu maddələr ancaq sintetik preparativ metodla alınmışdır. Sm₂Se₃-Cu₂Se sistemi 1048K temperaturunadək qızdırıldıqda Cu₅SmSe₄ birləşməsi yaranır və onun ərimə temperaturu 1353 K olur [6]. Belə faza ancaq 1270K

temperaturadək stabil qalır, ondan yuxarıda parçalanır. Əliyeva və d. [7] elektrik hərəkət qüvvəsi metodu [8] ilə Sm₂Se₃–Cu₂Se sistemində yaranan Cu₅SmSe₄, Cu₃SmSe₃, CuSmSe₂, CuSm₅Se₈ birləşmələrin termodinamiki funksiyaları müəyyənləşdirmişlər. Cu₅SmSe₄ birləşməsi yenidən sintez edilərək onun polikristalı alınmış və adiabatik kalorimetriya üsulu ilə istilik tutumu tədqiq edilmiş və termodinamiki parametrlər hesablanmışdır [9].

Bu işdə Cu₅SmSe₄ birləşməsi haqqında bilgiləri genişləndirmək məqsədilə geniş temperatur bölmündə kinetik parametrlər tədqiq olunmuşdur.

EKSPERIMENTİN APARILMASI

Cu₅SmSe₄ birləşməsini sintez etmək üçün Cu- 99,990%, CMM-1 markalı Sm, Se- 99,999% elementləri 5:1:4 molekulyar nisbətində götürülərək içərisi əvvəlcədən qrafitlənmiş kvarts ampulun içərisinə doldurularaq 1.3×10^{-3} Pa vakuum yaradılmışdır. Sintez zamanı Sm₂Se₃–Cu₂Se sisteminin hal diaqramından və onun termoqrafiki analizinin nəticələrindən [5,6] istifadə olunmuşdur.

Mis, samarium və selendən ibarət qarışıq qızdırıldıqda, əvvəlcə 648K temperaturda Cu₂Se birləşməsi, 923K temperaturda isə Sm₂Se₃ birləşməsi əmələ gəlir. Temperatur 1158K dərəcəyədək yüksəldikdə Cu₂Se və Sm₂Se₃ arasında qarşılıqlı təsir başlayır və Cu₅SmSe₄ birləşməsi əmələ gəlir. Ampulda temperatur 1333K-ə qədər yüksəldilərək 30 dəqiqə saxlanılmışdır. Sonrakı mərhələdə ampula 1033K temperaturda 168 saat saxlandıqdan sonra otaq temperaturunadək soyudulur. Sintez olunmuş maddə külçə halında və parıltılı tünd alüminium rəngində alınır.

Ampuldan çıxarılan maddə döyülərək ovuntu halına salınmış, 250 MPa təzyiq altında preslənərək 2x20x2mm³ ölçülü paralelepiped şəklində nümunələr alınmışdır. Qara rəngdə alınan nümunələr 450÷500K temperaturalarda 144 saat müddətində saxlanılaraq tabı alınmışdır.

Elektrik ölçülərini aparmaq üçün 12x3x2mm³ ölçüdə nümunələr kəsilmiş, üzləri paradaqlanaraq azot turşusunda dağlanmışdır.

Nümunənin səthinin tədqiqi MİM-8 optik mikroskopunda aparılmışdır. Nümunələrin səthinin şəkillərini çəkmək üçün mikroskopun okulyarında rəqəmli videokamera yerləşdirilmişdir. Alınan görünüş 1-ci şəkildə verilmişdir.

Dörd zondlu metoddan istifadə olunaraq 80÷400K temperatur bölmündə elektrik keçiriciliyi, termoelektrik hərəkət qüvvəsi və Holl əmsalı kompleks şəkildə tədqiq olunmuşdur. Zondlar nümunəyə gümüş pastası ilə bərkidilmişdir. Holl əmsalı, elektrik keçiriciliyi və termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılığı uyğun olaraq 2, 3, 4 – cü şəkillərdə verilmişdir.

NƏTİCƏLƏRİN ARAŞDIRILMASI

1-ci şəkildən göründüyü kimi preslənmiş nümunələrin səthi dendrid quruluşa malikdir.



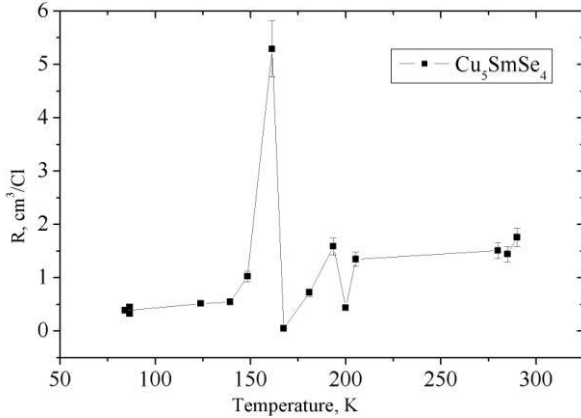
Holl əmsalının temperatur asılılığı (2-ci şəkil) göstərir ki, nümunələrdə dəşiklərin konsentrasiyası 10^{19}sm^{-3} tərtibindədir və 150K yuxarı temperaturalarda onun temperaturdan asılılığı sıçrayışla dəyişir.

Şəkil 1.

Cu₅SmSe₄ birləşməsinin mikroqrafikası (böyütmə 200 dəfə).

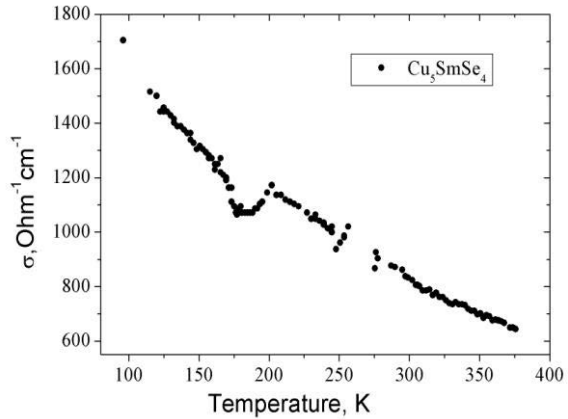
180÷200K temperatur bölmündə elektrik keçiriciliyi və termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılığında da xüsusiyyət vardır (3 və 4-cü şəkillər): elektrik keçiriciliyi və termoelektrik hərəkət qüvvəsi minimumdan keçir. Bu xüsusiyyət həmin

temperatur bölgəsində faza keçidinin baş verməsi ilə və ya yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının dəyişməsi hesabına baş verə bilər. Bu səbəbdən keçiddən əvvəl, sonra və keçid temperaturunda rentgen şüalarının difraksiya spektrləri tədqiq olunmuş və heç bir struktur dəyişikliyinə baş vermədiyi müəyyən olunmuşdur. Ona görə də yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının və yürüklüyünün dəyişməsi hesabına bu xüsusiyyətlərin baş verdiyini ehtimal etmək olar. Doğrudan da həmin temperatur bölümündə Holl sabitinin sıçrayışla dəyişməsi elektrik keçiriciliyin minimumdan keçməsinə səbəb ola bilər. Termoelektrik hərəkət qüvvəsinin dəyişməsi isə konsentrasiyanın dəyişməsinə uyğun gəlmir - konsentrasiya azaldığına görə o artmalı idi, əksinə, azalır. Ona görə də xüsusiyyətin üçüncü səbəbdən yarandığını - samariumun valentliyinin həmin temperatur bölümündə dəyişməsi hesabına baş verdiyini ehtimal etmək olar.



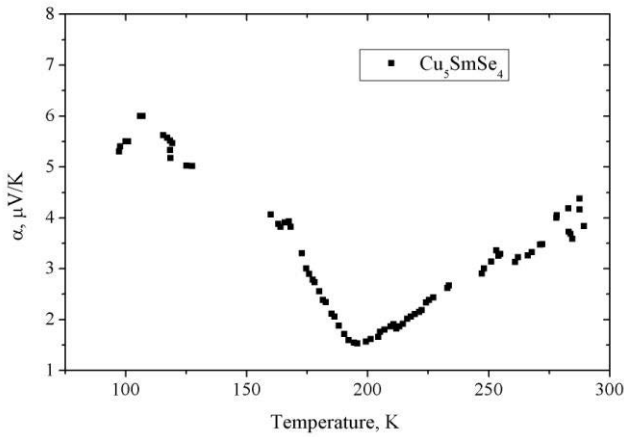
Şəkil 2.

Cu_5SmSe_4 birləşməsi üçün Holl sabitinin temperatur asılılığı.



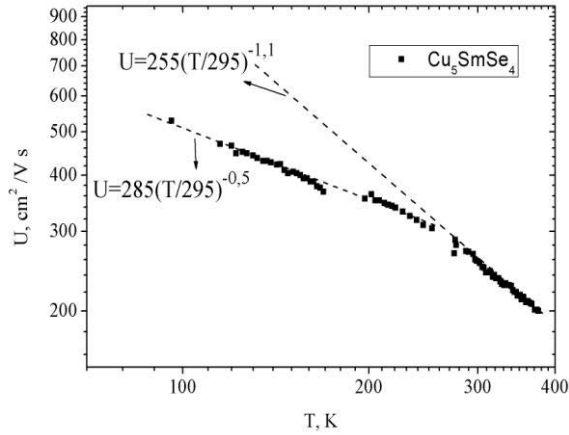
Şəkil 3.

Cu_5SmSe_4 birləşməsi üçün elektrik keçiriciliyin temperatur asılılığı.



Şəkil 4.

Cu_5SmSe_4 birləşməsi üçün termoelektrik hərəkət qüvvəsinin temperatur asılılığı.



Şəkil 5.

Cu_5SmSe_4 birləşməsi üçün yürüklüyün temperatur asılılığı.

Qeyd etmək lazımdır ki, samariumun valentliyinin dəyişməsi özünü SmS monokristalında daha aydın göstərir: müəyyən temperatur bölümündə xarici temperatur qradienti mövcud olmadıqda belə elektrik hərəkət qüvvəsi və Mott tipli I növ metal-yarımkeçirici faza keçidi yaranır. Kamenskiy və b. [10, 11] göstərmişlər ki, elektrik hərəkət qüvvəsinin yaranması və Mott tipli I növ metal-yarımkeçirici faza keçidinin yaranması defekt kimi düşünlər arasında yerləşən Sm ionlarının valentliyinin ikidən üçə dəyişməsi ilə bağlıdır. Eksperiment zamanı ~460K temperatur ətrafında amplitudası 2.5V

və davamətmə müddəti 1.3s olan impulsar alınmışdır, həmçinin fasiləsiz rejimdə 375÷405K bölgəsində elektrik hərəkət qüvvəsinin maksimal qiyməti üçün ~50mV alınmışdır. Müəlliflər, düyünlər arasında yerləşən Sm²⁺ ionlarından ibarət aşqar sistemində Mott tipli faza keçidi nəticəsində samarium ionlarının valentliyinin dəyişməsinə iki səbəbdən baş verdiyini ehtimal edirlər: 1) faza keçidi zamanı istiliyin udulması və ya buraxılması nəticəsində temperatur qradienti yaranır; 2) valent dəyişməsi nəticəsində keçirici elektronların konsentrasiya qradienti yaranır. Müəlliflərin fikrincə düyünlər arasında yerləşərək defekt yaradan samarium ionlarının valentliyinin dəyişməsi prosesi əsasında yaradılacaq çeviricilər istilik enerjisinin elektrik enerjisinə birbaşa çevirməyə imkan verəcək.

Cu₅SmSe₄ birləşməsində Cu birvalentlirdirsə Sm üçvalentli olmalı idi. Lakin, yuxarı temperaturlarda sintez prosesi zamanı mis iki valentli hala keçə bilər. Belə halda neytrallıq şərtinə görə Sm ikivalentli olacaqdır və 280÷200K temperatur intervalında Sm²⁺ ionları Sm³⁺ ionlarına çevrilir ($\text{Sm}^{2+} \leftrightarrow \text{Sm}^{3+} + e^-$). Sm ionlarından ibarət defektlər qeyri bərabər paylandığından, valentliyin dəyişməsi nəticəsində keçirici elektronların konsentrasiyasında qradient yaranır ki, bu elektrik hərəkət qüvvəsinin yaranmasına səbəb olur. Yaranan elektrik hərəkət qüvvəsi dəşiklərin hesabına yaranan termoelektrik hərəkət qüvvəsinə əks yönəldiyindən, son nəticədə termoelektrik hərəkət qüvvəsinin effektiv qiyməti azalmış olur.

Valent dəyişməsi nəticəsində yeni yaranan keçirici elektronlarla dəşiklərin bir qisminin kompensasiyası elektrik keçiriciliyini azaldaraq onun minimumdan keçməsinə, həmçinin Holl sabitinin sıçrayışla dəyişməsinə səbəb olduğunu ehtimal etmək olar.

Yükdaşıyıcıların Holl yürüklüyünün temperatur asılılığı (5-ci şəkil) 80÷230K temperatur bölümündə $U = 285(T/295)^{-0.5}$, 250-400K temperatur bölümündə isə $U = 255(T/295)^{-1.1}$ asılılığı ilə dəyişir. U(T) asılılığının ayrı-ayrı temperatur bölümlərində müxtəlif cür dəyişməsi samariumun valentliyinin dəyişməsi nəticəsində yükdaşıyıcıların səpilmə mexanizminin mürəkkəb xarakter daşdığını göstərir.

Müşahidə olunan xüsusiyyətlərin fiziki mahiyyətinə daha da aydınlıq gətirmək üçün gələcək tədqiqatlarda dəqiq və avtomatik qurğuda xarici temperatur qradienti olmadığı halda nümunədə elektrik hərəkət qüvvəsinin yaranıb–yaranmadığını müəyyən etməyə ehtiyac var.

Müəlliflər, nəticələrin müzakirəsində iştirakına və məsləhətinə görə prof. D.H.Arashya təşəkkürünü bildirir.

1. П.Г.Рустамов, О.М.Алиев, Т.Х.Курбанов, *Тройные халькогениды редкоземельных элементов*, Баку, «Элм», (1981) 228.
2. П.Г. устамов, О.М.Алиев, Г.Г.Гусейнов, М.А.Алиджанов, А.Б.Агаев, *Тройные соединения типа $A_5^I B^{III} C_4^{VI}$* . Неорганические материалы, **12** (1976) 1192-1195.
3. Д.И.Хомский, *Проблемы промежуточной валентности*, УФН, **129** (1979) 443-485.
4. И.А.Смирнов, *Редкоземельные полупроводники – перспективы и применение*, Журнал всесоюзного химического общества им Д.И.Менделеева, **26**, 6 (1981) 2-11.
5. J.P.Maud, M.Guittard, *Chimie Minerale – Composes CuLS_2 et CuLSe_2 formes par les lanthanoides legers*, C.R. Acad., Sc. Paris., **267** №14 Serie C (1968) 823 - 826.
6. Н.Ю.Прибыльский, Р.С.Гамидов, *Система $\text{Cu}_2\text{Se} - \text{Sm}_2\text{Se}_3$* , Журнал неорганической химии, **28** (1983) 719-723.
7. Е.Р.Алиева, И.Я.Алиев, З.И.Сулейманов, А.С.Аббасов, *Исследование термодинамических свойств системы $\text{Cu}_2\text{Se}-\text{Sm}_2\text{Se}_3$* , Физика, **13** №4 (2007) 134-135.

8. А.С.Аббасов, А.В.Никольская, Я.И.Герасимов, *Исследование термодинамических свойств теллуридов галлия, ДАН СССР, 14 (1964) Page.*
9. Y.R.Əliyeva, Z.İ.Süleymanov, A.S.Abbasov, M.Ə.Alcanov, *Cu₅SmSe₄ birləşməsinin istilik tutumu və termodinamiki funksiyaları, Fizika, 15 №2 (2009)122-123.*
10. В.В.Каминский, С.М.Соловьёв, Возникновение электродвижущей силы при изменении валентности ионов самария в процессе фазового перехода в монокристаллах SmS, *ФТТ, 43 (2001) 423-426.*
11. В.В.Каминский, С.М.Лугуев, З.М.Омаров, Н.В.Шаренкова, А.В.Голубков, Л.Н.Васильев, С.М.Соловьёв, *Температурная зависимость коэффициента теплового линейного расширения монокристаллического SmS, Физ. и Тех. Полупроводников, 41 (2007) 3-6.*

FEATURES OF KINETIC PROPERTIES OF Cu₅SmSe₄ COMPOUND

R.N.RAHIMOV, Y.R.ALIYEVA, Z.I.SULEYMANOV, G.G.GUSEYNOV

The electrical conductivity, Hall coefficient and thermoelectric power of Cu₅SmSe₄ compound at the temperature range between 80 and 450K have been investigated. The observed features on the temperature dependence of kinetic coefficients at the defined temperatures have been explained by changing the samarium valance.

ОСОБЕННОСТИ КИНЕТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СОЕДИНЕНИЯ Cu₅SmSe₄

Р.Н.РАГИМОВ, Е.Р.АЛИЕВА, З.И.СУЛЕЙМАНОВ, К.Г.ГУСЕЙНОВ

Исследованы электропроводность, коэффициент Холла и термоэлектродвижущая сила соединения Cu₅SmSe₄ в интервале температур 80÷400К. Наблюдаемые особенности в температурной зависимости кинетических коэффициентов объясняются изменением валентности самария в определенной температурной области.

Редактор: Д.Араслы

УДК 538.975; 537.226.4

**FeIn₂S₄–ÜN DIELEKTRİK NÜFUZLUĞUNUN TEMPERATURDAN VƏ
DƏYİŞƏN ELEKTRİK CƏRƏYANININ TEZLİYİNDƏN ASILILIĞI**

N.N.NİFTİYEV, O.B.TAĞIYEV*, F.M.MƏMMƏDOV, M.B.MURADOV***,
Ü.F.QASIMOV*, F.A.KAZIMOVA***

Azərbaycan Dövlət Pedaqoji Universiteti

AZ 1000, Bakı, Ü. Hacıbəyov, 34

*AMEA Fizika institutu**

AZ 1143, Bakı, H. Cavid pr., 33

*AMEA Kimya Problemləri İnstitutu***

AZ 1143, Bakı, H. Cavid pr., 29

*Bakı Dövlət Universitet****

AZ 1145, Bakı, Z. Xəlilov, 23

namiq7@bk.ru

Daxil olub: 16.05.2011
Çapa verilib: 05.09.2011

Açar sözlər: kristal, dielektrik nüfuzluğu, rezonans, çəpər modeli, aktivləşmə enerjisi, cərəyan, relaksasiya müddəti, polyarizasiya mexanizmi

REFERAT

FeIn₂S₄ birləşməsinin müxtəlif temperatur və tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissəsi tədqiq edilməkdir. Tezliyin müəyyən qiymətlərində ε' üçün rezonans hadisəsi müşahidə edilməmiş və çəpər modelinin köməyi ilə izah edilməmişdir. Bu birləşmə üçün aktivləşmə enerjisi hesablanmış və $\Delta E_1 = 0,44\text{eV}$ və $\Delta E_2 = 0,49\text{eV}$ qiymətləri tapılmışdır. FeIn₂S₄-də relaksasiya müddəti hesablanmış və bu kristalda istilik hərəkəti ilə çərtlənən elektron polyarizasiya mexanizminin olması müəyyən edilmişdir.

Son zamanlar AB₂X₄ (burada A- Mn, Fe, Co, Ni; B- Ga, In; X- S, Se, Te) tipli çoxkomponentli birləşmələr müasir yarımkeçirici elektronikanın funksional imkanlarını genişləndirmək üçün geniş potensiala malik olduğuna görə tədqiqatçıların böyük marağına səbəb olmuşdur [1-10]. Bu birləşmələr müxtəlif təyinatlı yarımkeçirici qurğular yaratmaq üçün perspektivlidir. Bu materialların əsasında fotohəssas strukturlar hazırlanmışdır [11-15], FeIn₂S₄ birləşməsindən nanosturuktur sintez edilmişdir [16-17].

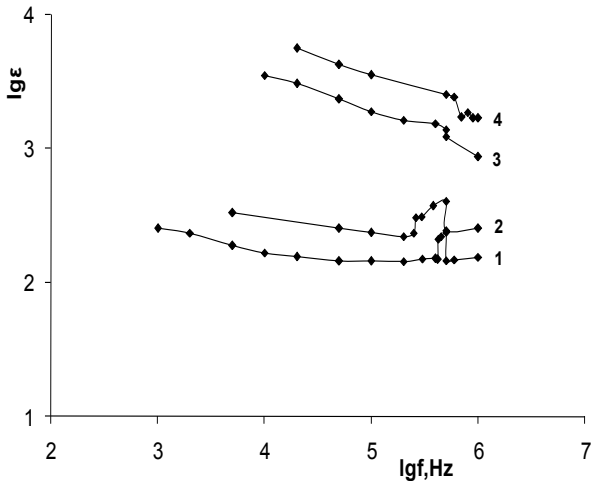
FeIn₂S₄ kristalı stexiometrik miqdarda yüksək təmizlikli (99,999%) elementlər birləşməsinin sintezindən alınmışdır. Rentgenoqrafik metodla analiz nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, FeIn₂S₄ birləşməsi kristal qəfəs parametrləri $a=10,62\text{\AA}$ olan qrupel quruluşu malik olur [18-19]. Dielektrik xassələrini öyrənmək üçün qalınlığı $\sim 0,5\text{mm}$ olan kristal lövhələrə gümüş pastası vuraraq kondensatorlar hazırlanmışdır. Kristallar 293÷400K temperatur intervalında tənzimlənə bilən kriostatda yerləşdirilmişdir. Temperatur ölçmələrinin dəqiqliyi $\pm 0,5\text{K}$ təşkil edir. Elektrik tutumunun və dielektrik itkisinin tangens bucağının ölçülməsi E7-20 ($25\div 10^6\text{Hz}$) rəqəmli immetans ölçü cihazının köməyi ilə aparılmışdır. Nümunəyə 1V ölçmə gərginliyi verilmişdir.

Dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsi $\varepsilon' = C d / \varepsilon_0 S$, xəyali hissəsi isə $\varepsilon'' = \tan \delta \cdot \varepsilon'$ ifadələrindən hesablanmışdır.

gəkil 1-də FeIn₂S₄ üçün müxtəlif temperaturlarda dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin tezlikdən asılılıq qrafiki verilmişdir. gəkildən görünür ki, bağıngıca dielektrik nüfuzluğu 293÷323K temperaturlarda $5 \cdot 10^3 \div 2 \cdot 10^5\text{Hz}$ tezlik oblastında yavaş sürətlə azalır, sonra isə $2 \cdot 10^5 \div 5 \cdot 10^5\text{Hz}$ tezlik intervalında rezonans hadisəsi baş verir. Daha sonra isə temperatur yüksəldikcə rezonans hadisəsi yox olur. Baş verən rezonans

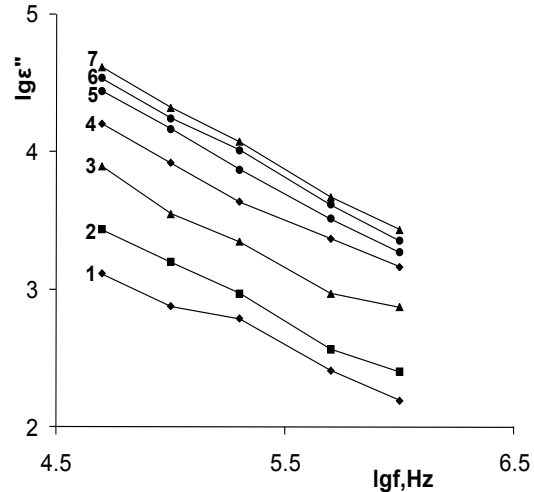
hadisəsini çəpər modelinin[20] köməyi ilə belə izah etmək olar ki, defekti olan mono və polikristallarda yüksək omlu laylardan başqa lokal çəpərlərin özəkləri arasında dislokasiya, elektrik domeni və s. tipli müxtəlif qeyri bircinsli ağağı omlu bağlayıcı laylar yerləşə bilər. Bağlayıcı laylar aktiv element olur. Belə ki, onların qalınlığı və birləşmə dərəcəsi gərginlikdən və elektrik sahəsinin tezliyindən asılı olur. Əgər ν tezliyi (ν - konsentrasiya dalğasında rəqs tezliyidir) d-layın qalınlığından və dreyf sürətindən təyin olunarsa onda [20] -ə görə alarıq:

$$2d = \mu F / \nu = g_{dr} / \nu \quad (1)$$



Şəkil 1.

FeIn₂S₄ kristalı üçün müxtəlif temperaturlarda dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin elektrik sahəsinin tezliyindən asılılığı. T, K: 1-293, 2-323, 3-338, 4-353.



Şəkil 2.

FeIn₂S₄ kristalı üçün müxtəlif temperaturlarda dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsinin elektrik sahəsinin tezliyindən asılılığı. T, K: 1-296, 2-311, 3-326, 4-341, 5-356, 6-366, 7-376.

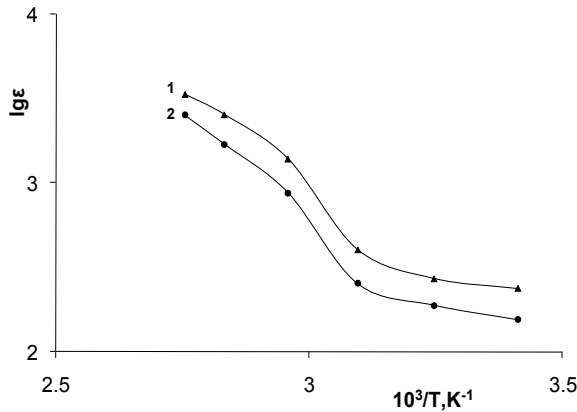
Məsələn $d \sim 10^{-4}$ sm və $v_{dr} \sim 10^2$ sm/s olarsa onda $\nu = 5 \cdot 10^5$ Hz alarıq. Bizim halda FeIn₂S₄ – də dəyişən elektrik sahəsində sahənin f tezliyi ν tezliyinə yaxın olduğu üçün rezonans hadisəsi müşahidə olunur. Rezonans hadisəsinin yox olmasını belə izah etmək olar ki, temperatur yüksəldikcə ν tezliyi (bildiyimiz kimi bu tezlik layın d qalınlığından və dreyf yükdaşıyıcıların dreyf sürətindən təyin olunur) yüksəlir və xarici f dəyişən cərəyan tezliyindən fərqlənir və rezonans hadisəsi baş vermir.

Şəkil 2-də FeIn₂S₄ kristalı üçün müxtəlif temperaturlarda dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsinin tezlikdən asılılığı göstərilmişdir. $5 \cdot 10^4 \div 2 \cdot 10^5$ Hz tezlik intervalında tezlik artdıqca ϵ'' - in sürətlə azalması baş verir. $5 \cdot 10^5 \div 10^6$ Hz tezlik intervalında isə ϵ'' - in nisbətən yavaş azalması müşahidə olunur.

Şəkil 3-də FeIn₂S₄ birləşməsi üçün 500kHz (1 əyrisi) və 1MHz (2 əyrisi) tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin temperaturdan asılılıq qrafiki verilmişdir. Şəkilədən görünür ki, 323÷373K temperatur intervalında ϵ' bir qədər sürətlə artır. Bu hissə üçün $\lg \epsilon' \sim 10^3/T$ asılılığından aktivləşmə enerjisi hesablanmış və $E = 0,44$ eV qiyməti tapılmışdır. Temperatur artdıqca dielektrik nüfuzluğunun artmasının səbəbi yükdaşıyıcıların konsentrasiyasının artmasıdır.

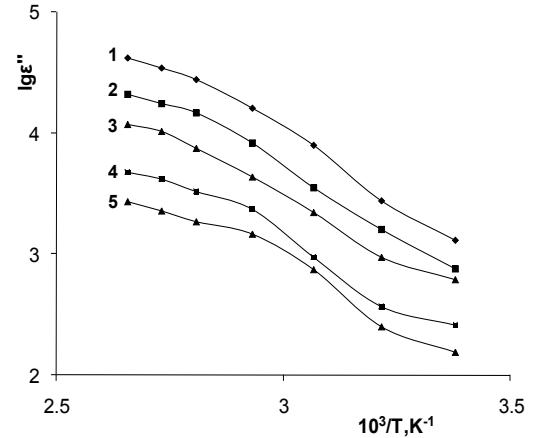
Şəkil 4-də FeIn₂S₄ kristalı üçün müxtəlif tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsinin temperaturdan asılılıq qrafiki təsvir edilmişdir. Şəkilədən görünür ki, əvvəlcə 296÷326K temperatur intervalında ϵ'' temperatur artdıqca bir qədər sürətlə artır. 341÷376K temperaturlarda isə temperatur artdıqca ϵ'' -in yavaş artımı müşahidə edilir.

296÷341K temperatur intervalında 1MHz (5 əyrisi) tezlikdə $\lg \varepsilon'' \sim 10^3/T$ asılılığından aktivləşmə enerjisi təyin edilmiş və $\sim 0,44\text{eV}$ qiyməti tapılmışdır. Qeyd etmək lazımdır ki, $\sim 0,44\text{eV}$ qiyməti $\lg \varepsilon' \sim 10^3/T$ və $\lg \zeta \sim 10^3/T$ [21] asılılığından da təyin edilmişdir. $5 \cdot 10^4\text{kHz}$ (1 əyrisi) tezlikdə isə $\lg \varepsilon'' \sim 10^3/T$ asılılığından tapılmış aktivləşmə enerjisinin qiyməti $0,49\text{eV}$ -a bərabər olmuşdur Burada da tezlikdən asılı olaraq $\Delta E^{\varepsilon''}$ - nin qiyməti dəyişir.



Şəkil 3.

FeIn₂S₄ kristalı üçün 500kHz (1 əyrisi) və 1 MHz (2 əyrisi) tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi hissəsinin temperaturdan asılılığı.



Şəkil 4.

FeIn₂S₄ kristalı üçün müxtəlif tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsinin temperaturdan asılılığı. f, Hz: 1- $5 \cdot 10^4$, 2- 10^5 , 3- $2 \cdot 10^5$, 4- $5 \cdot 10^5$, 5- 10^6 .

Məlumdur ki, dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissəsi üçün Debay tənlikləri aşağıdakı kimidir [20]

$$\varepsilon' = \varepsilon_{\infty} + \frac{\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty}}{1 + \omega^2 \tau^2}, \quad (2)$$

$$\varepsilon'' = \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \cdot \omega} + \frac{(\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty})\omega\tau}{1 + \omega^2 \tau^2}. \quad (3)$$

(2) və (3) ifadələrindəki ε' və ε'' - in temperatur asılılığı tədqiq olunan maddələrin relaksasiya müddətinin (τ) və elektrik keçiriciliyinin (σ) temperatur asılılığından təyin olunacaqdır. ε' və ε'' - in tezlik asılılığı elektrik keçiriciliyin mexanizmindən asılı olacaqdır (keçiriciliyin zona mexanizmi zamanı $\sigma \neq \sigma(\omega)$ və sıçrayıqmexanizmi zamanı isə $\sigma = \sigma(\omega)$ olur).

Keyfiyyət tərəfdən ε' və ε'' -in temperatur və tezlik asılılıqlarına nəzər yetirək. Fərz edək tədqiq olunan material keçirici dielektrik və yapıs keçirən yarımkeçiricidir. Onda aşağı tezlikli oblast üçün ($\omega\tau \ll 1$) (2) və (3) ifadələrindən alarıq

$$\varepsilon' = \varepsilon_s = \text{const}, \quad (4)$$

$$\varepsilon'' = (\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty})\omega\tau + \frac{\sigma}{\varepsilon_0 \cdot \omega}, \quad (5)$$

(4)-dən görünür ki, aşağı tezlikli oblastda həqiqi dielektrik nüfuzluğu (ε') sabit olur və statik dielektrik nüfuzluğuna (ε_s) bərabər olur.

Dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsi (5) ifadəsinin II həddinə görə tezlik artdıqca azalmalıdır. Məlumdur ki, ε'' özündə σ və τ -ni ifadə edir. Tədqiq olunan maddələr üçün bu kəmiyyətlər özü temperaturdan asılıdır və həmçinin σ tezlikdən asılı olur. Ona görə də zona və sıçrayıqmexanizmlərində dispersiya əyrisi müxtəlif olacaqdır.

Əgər aktiv keçiricilikdə üstün rolu zona mexanizmi oynayarsa, yəni $\sigma \neq \sigma(\omega)$, $\sigma \sim \exp(-\Delta E_{\sigma}/kT)$ və $\tau \sim \exp(\Delta E_{\mu}/kT)$ onda (5) dən alarıq

$$\varepsilon'' \approx \frac{1}{\varepsilon_0 \omega} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\sigma}}{kT}\right) + (\varepsilon_s - \varepsilon_{\infty}) \cdot \omega \exp\left(\frac{\Delta E_{\mu}}{kT}\right), \quad (6)$$

(6) – ya görə açağı tezlikli oblastda tezlik artdıqca dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsi bütünlüklə azalmalıdır.

FeIn₂S₄ birləşməsinin elektrik keçiriciliyinin temperatur və tezlikdən asılılıqlarının tədqiqi nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmələrdə elektrik keçiriciliyi zona mexanizmi ilə əlaqədardır [22].

gəkil 3-dən görünür ki, açağı tezliklərdə tezlik artdıqca ε'' -in bütövlüklə azalması baş verir. Onların temperaturdan asılılıqları isə $\Delta E_{\sigma}/\Delta E_{\mu}$ nisbətindən asılı olacaqdır. Adətən $\Delta E_{\sigma} > \Delta E_{\mu}$ olur. Onda açağı tezlikli oblastda (6) ifadəsindən alarıq

$$\varepsilon'' \sim \frac{1}{\varepsilon_0 \omega} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\sigma}}{kT}\right) + const. \quad (7)$$

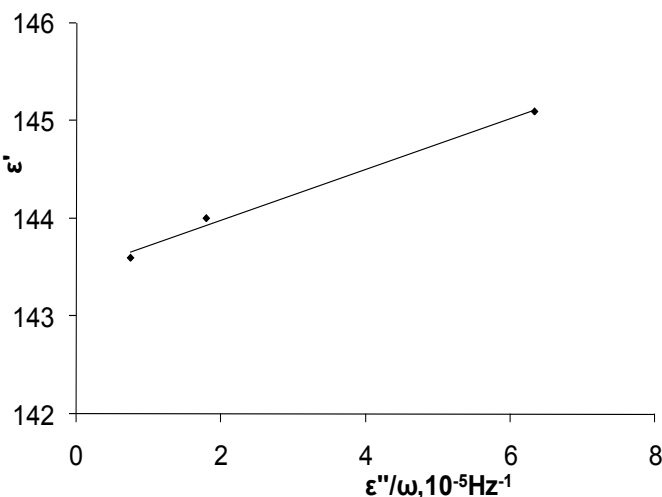
Belə ki, açağı tezlikli oblastda temperatur yüksəldikcə $\varepsilon''_{a.t.}$ eksponensial olaraq artmalıdır.

gəkil 4-də FeIn₂S₄ birləşməsinin tezliyin sabit qiymətlərində dielektrik nüfuzluğunun xəyali hissəsinin temperaturdan asılılıq qrafikindən görünür ki, açağı tezlikli oblastda temperatur yüksəldikcə ε'' eksponensial olaraq artır.

Debay tənliklərinin təqribiliyinə baxmayaraq onlardan relaksasiya müddətinin qiymətini hesablamaq olar. Doğrudan da (4) və (5)-dən sadə çevrilmələr aparmaqla almaq olar

$$\varepsilon' = \varepsilon_{\infty} + \frac{1}{\tau} \cdot \frac{\varepsilon''}{\omega} \quad (8)$$

(8) ifadəsindən görünür ki, ε_{∞} yüksək tezlikli dielektrik nüfuzluğunun qiymətini və τ relaksasiya müddətini $\varepsilon' = f(\varepsilon''/\omega)$ asılılığından alınan düz xəttin ordinat oxu ilə



kəsişməsindən və bu düz xəttin tangens bucağından təyin etmək olar. Otaq temperaturunda $\varepsilon' = f(\varepsilon''/\omega)$ təcrübi asılılığı FeIn₂S₄ birləşməsi üçün Şəkil 5-də göstərilmişdir. gəkildən görünür ki, $\varepsilon' = f(\varepsilon''/\omega)$ asılılığında bütövlükdə xəttilik müşahidə olunur. Bu asılılıqdan ε_{∞} və τ -nin qiymətləri hesablanmışdır və $\varepsilon_{\infty} = 143.6$, $\tau = 1,3 \cdot 10^{-5}$ san. bərabər olur.

Şəkil 5.

FeIn₂S₄ kristalı üçün otaq temperaturunda $\varepsilon' \sim f(\varepsilon''/\omega)$ asılılığı.

Relaksasiya müddətini bilməklə bu birləşmədə polyarizasiya mexanizmi haqqında fikir söyləmək olar.

Məlumdur ki, elektron elastiki polyarizasiya prosesinin yaranma müddəti $10^{-16} \div 10^{-17}$ san qiymətləndirilir. Çün elastiki polyarizasiyasının yaranma müddəti $10^{-14} \div 10^{-15}$ san-dir. Çtilik hərəkəti ilə Çrtlənən dipol polyarizasiyasında relaksasiya müddəti $10^{-4} \div 10^{-10}$ san olur. Çün istilik polyarizasiyası zamanı relaksasiya müddəti $\tau = 10^{-4} \div 10^{-8}$ san intervalında olur. Çtilik hərəkəti ilə Çrtlənən elektron polyarizasiyası

zamanı relaksasiya müddəti $10^{-2} \div 10^{-7}$ saniyəyə bərabər olur. FeIn₂S₄ birləşməsində polyarizasiya zamanı relaksasiya müddəti $1,3 \cdot 10^{-5}$ s-ə qismətini alır. Bu da istilik hərəkəti ilə qətlənən elektron polyarizasiyasına uyğun gəlir. Bu polyarizasiya mexanizmi bərk dielektriklər üçün xarakterikdir [23].

Beləliklə, içə FeIn₂S₄ birləşməsinin müxtəlif temperatur və tezliklərdə dielektrik nüfuzluğunun həqiqi və xəyali hissəsi tədqid edilmişdir. Tezliyin müəyyən qiymətlərində ϵ' üçün rezonans hadisəsi müşahidə edilmiş və çəpər modelinin köməyi ilə izah edilmişdir. Bu birləşmə üçün aktivləşmə enerjisi hesablanmış və $\Delta E_1=0,44\text{eV}$ və $\Delta E_2=0,49\text{eV}$ qiymətləri tapılmışdır. FeIn₂S₄ birləşməsində relaksasiya müddəti hesablanmış və istilik hərəkəti ilə qətlənən elektron polyarizasiya mexanizminin olması müəyyən edilmişdir.

1. V.Ursaki, F.Manjon, I.Tiginyanu and et al., *Raman scattering study of pressure - induced phase transitions in MnIn₂S₄ spinels*, *J. of physics: Condensed Matter*, **14** (2002) 304-308.
2. Н.Н.Нифтиев, О.Б.Тагиев, *Влияние освещения на вольтамперные характеристики и электропроводность монокристаллов MnGaInS₄*, *Письма в ЖТФ*, **29** (2003) 49-53.
3. Н.Н.Нифтиев, О.Б.Тагиев, *Вольтамперные характеристики монокристаллов MnIn₂S₄ и MnGa₂S₄*, *ФТП*, **38** (2004) 164-165.
4. R.Sharma, A.Rastogi, S.Kohli and et al., *Growth phasses in the formation of semiconducting manganese indium sulphide thin film and their effect on the optical absorption*, *Physica B*, **351** (2004) 45-52.
5. C.Xiangying, Z.Zhongjie, Z.Xingta and et al., *Hydrothermal synthesis of porous FeIn₂S₄ microspheres and their elektrochemical properties*, *J. of Crystal Growth*, **277** (2005) 524-528.
6. M.Quintero, M.Morocoima, E.Guerrero, J.Ruiz, *Temperature variation of lattice parameters and thermal expansion coefficients of the compound MnGa₂Se₄*, *Physica status solidi (a)*, **146** (2006) 587-593.
7. V.Sagredo, M.C.Moron, L.Betancourt, G.E.Delgado, *Antiferromagnetic versus Spin-glass like behavior in MgIn₂S₄*, *J. of Magnetic Materials*, **312** (2007) 294-297.
8. K.Rushchanskii, H.Haeuseler, D.Bercha, *Band structure calculations on the layered compounds FeGa₂S₄ and NiGa₂S₄*, *J.of physics and chemistry of solids*, **63** (2008) 2019-2028.
9. Н.Н.Нифтиев, О.Б.Тагиев, *Влияние сильного электрического поля на электропроводность монокристаллов MnGa₂S₄, MnIn₂S₄ и MnGaInS₄*, *ФТП*, **43** (2009) 1172-1174.
10. Н.Н.Нифтиев, О.Б.Тагиев, М.Б.Мурадов, Ф.М. Мамедов, Ф.А.Казымова, *Электропроводность монокристаллов MnGa₂S₄ на переменном токе*, *Письма в ЖТФ*, **35** (2009) 79-83.
11. Р.Н.Бежимбетов, Ю.В.Рудь, М.А.Таиров, *Диоды шоттки на магнитных полупроводниках MnIn₂Te₄ и MnGa₂Te₄*, *ФТП*, **21** (1987) 1051-1053.
12. И.В.Боднар, В.Ю.Рудь, Ю.В.Рудь, *Фоточувствительные структуры на монокристаллах MnIn₂S₄: создание и свойства*, *ФТП*, **43** (2009) 1549-1552.
13. И.В.Боднар, С.А.Павлюковец, В.Ю.Рудь, Ю.В.Рудь, *Выращивание монокристаллов FeIn₂S₄ и создание фоточувствительных структур на их основе*, *ФТП*, **43** (2009) 1553-1556.
14. И.В.Боднар, В.Ю.Рудь, Ю.В.Рудь, Е.И.Теруков, *Выращивание монокристаллов (In₂S₃)_x (FeIn₂S₄)_{1-x} и свойства фоточувствительных структур на их основе*, *ФТП*, **44** (2010) 39-43.

15. В.Ю.Рудь, Ю.В.Рудь, М.А.Осипова, И.В.Боднар, *Обнаружение твердых растворов $(\text{In}_2\text{S}_3)_x(\text{MnIn}_2\text{S}_4)_{1-x}$ и создание фоточувствительных структур на их основе*, *ФТП*, **44** (2010) 48-52.
16. G.Lu, J.Hu, K.Gian, G.Zhou, *The solvothermal sinthesis for monocrystalline FeIn_2S_4 at low temperature*, *Chem. Lett.*, **6** (1999) 481-482.
17. C.Xiangyinf, Z.Zhongjie, Z.Xingfa, L.Jianwei, Q.Yitai, *Hydrothermal synthesis of porous FeIn_2S_4 microspheres and their elektrochemical properties*, *J. of Cristal Growth*, **277** (2005) 524-528.
18. T.Kanomata, H.Ido, T.Kaneko, *Maqnetic and crystallographic studies of MIn_2S_4 , $\text{M}=\text{Mn, Fe, Co and Ni}$* , *J. Phys. Soc. Japan*, **34** (1973) 554.
19. П.Г.Рустамов, П.К.Бабаева, М.Р.Аллазов, *Диаграмма состояния разреза $\text{FeS}-\text{In}_2\text{S}_3$* , *Журн. Неорг. Химии*, **24** (1979) 2208-2211.
20. П.Г.Орешкин, *Физика полупроводников и диэлектриков*, М., Высшая школа, (1977) 448.
21. Н.Н.Нифтиев, Ф.М.Мамедов, *Электрические свойства FeIn_2S_4 на переменном токе*, *Fizikanın müasir problemləri, II respublika konfransının materialları*, Bakı, BDU, (2008) 212-215.
22. Н.Н.Нифтиев, М.А.Алиджанов, О.Б.Тагиев, М.Б.Мурадов, *Электрические свойства FeIn_2S_4* , *Україн. физ. журн.*, **47** (2002) 1054-1056.
23. Ю.М.Поплавко, *Физика диэлектриков*, Высшая школа, (1980) 400.

DEPENDENCE OF THE DIELECTRIC CONSTANT OF FeIn_2S_4 ON FREQUENCY OF ALTERNATING ELECTRIC CURRENTS AND TEMPERATURE.

N.N.NIFTIYEV, O.B.TAGHIYEV, F.M.MAMMADOV, M.B.MURADOV, U.F.GASIMOV, F.A.KAZIMOVA

The real and imaginary part of the dielectric constant of FeIn_2S_4 combination at various temperatures and frequencies has been studied. Resonance phenomenon for ϵ' has been observed in the certain values of the frequency and it has been explained by fence model. The activation energy for this combination has been calculated and $\Delta E_1=0,44\text{eV}$ and $\Delta E_2=0,49\text{eV}$ values have been found. The reaction term has been calculated in FeIn_2S_4 and electronic polarization mechanism conditioned by heating move has been determined in this crystal.

ЗАВИСИМОСТЬ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОНИЦАЕМОСТИ FeIn_2S_4 ОТ ЧАСТОТЫ ПЕРЕМЕННОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ТОКА И ТЕМПЕРАТУРЫ.

Н.Н.НИФТИЕВ, О.Б.ТАГИЕВ, Ф.М. МАМЕДОВ, М.Б.МУРАДОВ, У.Ф.ГАСЫМОВ, Ф.А.КАЗЫМОВА

Приводятся результаты исследования действительной и мнимой части диэлектрической проницаемости соединений FeIn_2S_4 при различных частотах и температурах. При определенном значении частоты в ϵ' наблюдается резонансное явление, что объясняется при помощи барьерной модели. Для этого соединения рассчитана энергия активации и найдено значение $\Delta E_1=0,44\text{eV}$ и $\Delta E_2=0,49\text{eV}$. В FeIn_2S_4 рассчитано время релаксации и установлено, что в этом кристалле присутствует механизм электронной поляризации, обусловленный тепловым движением.

Редактор: Р.Сардарлы

УДК 547.21: 536.423.1

ТЕПЛОТЫ ПАРООБРАЗОВАНИЯ АЛКАНОВ ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

А.Г.АХМЕДОВ

Азербайджанский Государственный Педагогический Университет
AZ 1000, Баку, Ул. Гаджибекова, 34
namiq7@bk.ru

поступила 12.04.2011 принята к печати 20.06.2011	РЕФЕРАТ
Ключевые слова: теплота парообразования, изо-алканы, гомологический ряд, критическая температура, поверхностное натяжение	С целью расчета теплоты парообразования нормальных и изо-алканов применена теория В.М.Татевского. Исследованы теплоты парообразования алканов при различных температурах. Предложена формула для расчета теплоты парообразования алканов в зависимости от температуры.

Изучение теплоты парообразования в зависимости от состава и структуры молекул и установление взаимосвязи с другими физическими свойствами имеют большое научное и прикладное значение [1;2]. С целью расчета теплоты парообразования и исследования зависимости теплоты парообразования от состава и структуры молекул алканов нами применена теория В.М.Татевского [3;4].

По теплоте парообразования *n*-гексана, 2,2-диметилпропана, 2-метилпентана, 3-метилпентана, 2,2-диметилбутана, 2,3-диметилбутана и *n*-гептана при 20⁰С нами определены теплоты парообразования связей C₁₂; C₂₂; C₁₃; C₂₃; C₁₄; C₂₄; C₃₃, которые соответственно равны 2020; 1180; 1573,5; 833,3; 1320; 690; 716 кал/моль. Зная величину теплоты парообразования вышеуказанных связей, по теории [3-4] мы рассчитали величину теплоты парообразования более ста алканов, которые составляют гомологические ряды: *n*-алканы, 2-метилалканы, 3-метилалканы, 2,2-диметилалканы, 2,3-диметилалканы, 2,4-диметилалканы, 3,3-диметилалканы, 3,4-диметилалканы и др. Теплоты парообразования указанных гомологический рядов, начиная с определенного члена, увеличиваются строго линейно в зависимости от числа углеродных атомов в молекуле.

Вопрос установления взаимосвязи между теплотой парообразования и поверхностной энергией неассоциированной жидкости теоретически рассматривался в работах [5,6]. Нами предлагается формула, отражающая взаимосвязь между теплотой парообразования и $\sigma(\mu\theta)^{2/3}$ [7] (где σ - поверхностное натяжение, $\mu\theta$ - молекулярный объем), которая для прикладных целей намного проще и удобнее, чем уравнения [5,6].

Физические свойства высших ($n \geq 10$) и, особенно изо-алканов, экспериментально исследованы недостаточно [8].

В данной работе излагаются результаты исследования теплоты парообразования нормальных и изо-алканов в зависимости от температуры и состава молекул. В работе [7] для гомологических рядов *n*-алканы, 2-метилалканы, 3-метилалканы, 2,2- диметилалканы и т.д.при 293К получены формула

$$L = L_0 + C\Delta[G(\mu V)^{2/3}] \quad (1)$$

где *L*- теплота парообразования, *L*₀ – постоянная для данного гомологического ряда, *C*- постоянная, *G*- поверхностное натяжение, μV - молярный объем.

$$G(\mu V)^{2/3} = B(T_K - T - \tau), \quad (2)$$

где *T*_к – критическая температура, *B* и τ считают постоянными.

В [7] показана несправедливость утверждения одновременной постоянства B и τ при исследовании величины $G(\mu V)^{2/3}$ для веществ, составляющих гомологический ряд. При постоянстве τ ($\tau=7=\text{const}$) величина B увеличивается в зависимости от состава молекул по формуле [7]

$$B=2,12+0,1315 \cdot (n-6). \quad (3)$$

Учитывая (2) и (3) для любого и начального членов гомологического ряда, из формулы (1) получим

$$L = L_0 + C[2,12 \cdot (T_k^n - T_k^z) + 0,1315(n-6)(T_k^n - T - \tau)], \quad (4)$$

где T_k^n и T_k^z - критические температуры любого и начального членов данного ряда.

Зная температурную зависимость теплоты парообразования одного из членов данного ряда и критические температуры веществ, составляющих данный гомологический ряд, можно определить теплоту парообразования любого члена этого ряда при различных температурах. Особенность формулы (4) состоит в том, что она отражает зависимость теплоты парообразования жидких алканов от температуры (L_0 , T), состава (n) и структуры (T_k , L_0) молекул.

В работе [7] универсальность постоянной C обоснована тем, что она не зависит от состава и структуры молекул при данной температуре и поэтому имеет одинаковые значения для всех алканов. Используя экспериментальные данные по теплотам парообразования при различных температурах [8] и по критическим температурам для n -гексана, n -гептана, 2-метилбуттана и 2-метилпентана, нами исследована зависимость $C=f(T)$. Значение C определяли по формуле

$$C = \frac{L_{c_{22}}}{[G(\mu V)^{2/3}]_{c_{22}}} = \frac{L_n - L_{n-1}}{[G(\mu V)^{2/3}]_n - [G(\mu V)^{2/3}]_{n-1}}, \quad (5)$$

где L_n и L_{n-1} - теплоты парообразования двух последовательных веществ данного ряда.

В интервале температур от -50 до 100°C величина C увеличивается от 10,50 до 13,07, а в интервале $100 \div 200^\circ\text{C}$ – в два раза (от 13,07 до 26,32). Следовательно, при повышенных температурах постоянная C очень чувствительна к изменению температуры.

Зависимость $C=f(T)$ в интервале температур от -50 до 100°C можно описать формулой

$$C=10,50+0,01733 (T-T_0), \quad (6)$$

где $T_0=223\text{K}$.

При повышенных температурах ($T>383\text{K}$) эта зависимость имеет более сложный характер. Следовательно, определяя величину C по формуле (6), L_0 (теплоту парообразования какого-либо члена данного ряда) при различных температурах и T_k^n , T_k^z по формуле (4), можно определить теплоту парообразования любого алкана при различных температурах. Постоянная C от состава и структуры молекул не зависит, а зависит только от температуры. Однако значения C для нормальных и изо-алканов, вычисленные по экспериментальным данным по формуле (5) в интервале от -50 до 100°C , отличаются друг от друга на $2 \div 4\%$, что объясняется неточностью экспериментальных данных.

Критические температуры алканов даны в работе [4]. С целью проверки формулы (4) нами вычислены теплоты парообразования n -октана в интервале от -50 до 100°C и проведено сравнение полученных данных с экспериментальными [8]; максимальное отклонение $\sim 0,5\%$. Учитывая отсутствие экспериментальных данных по теплотам парообразования высших алканов ($n \geq 10$) и большую точность

формулы (4), нами вычислены теплоты парообразования н-ундекана, н-додекана, н-тридекана и н-тетрадекана при различных температурах (Таблица). Наблюдается достаточно хорошее (~3%) совпадение полученных результатов с экспериментальными данными [8]. При расчете теплоты парообразования высших н-алканов за величину L_0 в формуле (4) были взяты теплоты парообразования н-гексана.

Таблица

Теплоты парообразования н-алканов L , кал/моль.

Т, К	н-октан		н-ундекан (640К)	н-додекан (659К)	н-тридекан (667К)	Н-тетра-декан (695К)
	Рас. по [4]	опыт [8]				
223	10605	10610	---	---	---	---
233	10531	10570	---	---	---	---
243	10446	10480	---	---	---	---
253	10351	10390	---	---	---	---
263	10251	10290	13776	---	---	---
273	10143	10190	13670	14834	16021	---
283	10034	10080	13562	14727	15914	17156
293	9934	9970	13447	14647	15840	17088
303	9817	9850	13365	14536	15730	16981
313	9681	9720	13221	14389	15580	16829
323	9548	9580	13098	14270	15466	16719
333	9418	9430	12969	14141	15337	16592
343	9270	9270	12809	13977	15169	16420
353	9125	9100	12670	13740	14934	16189
363	8958	8920	12508	13679	14876	16133
373	8770	8740	12324	13497	14693	15953
383	---	---	---	13268	14462	15720

Используя экспериментальные данные по теплотам парообразования изо-алканов [8], по формуле (4) нами вычислена также теплота парообразования 2-метилалканов, 2,2-диметилалканов, 3-метилалканов, 2,3 - диметилалканов и 2,2,4-триметилалканов при различных температурах.

1. Н.А.Иванова, Б.А.Безуглый, *Создание капель жидкости в пузырьках с использованием механизма капиллярной конвекции, управляемой пучком света. Письма в ЖТФ*, **31** (2005) 76-79.
2. Г.Н.Куружилин, Е.В.Лыков, *Критическая тепловая нагрузка при кипении жидкости в большом объеме, ЖТФ*, **2** (2010) 16-20.
3. В.М.Татевский, *Химическое строение углеродов и закономерность в их физикохимических свойствах, Изд.- во МГУ, М* (1953) 320.
4. В.М.Татевский и др., *Методы расчета физико-химических свойств парафиновых углеводородов, Гостоптехиздат, М* (1964) 45.
5. В.И.Рыков, *О скрытой теплоте парообразования неассоциированной жидкости. Ж. Физ. химии*, **34** (1960) 2013-2018.
6. В.И.Рыков, *Теплота парообразования и поверхностная энергия неассоциированной жидкости, Ж. физ. химии*, **36** (1962) 1519-1520.
7. А.Г.Ахмедов, *Теплоты парообразования алканов при различных температурах. Ж. физ. химии*, **53** (1979) 2354-2356.
8. Н.Б.Варгафтик, *Спр. теплофизическим свойствам газов и жидкостей, Физматгиз, М.*, (1963) 708.
9. Я.И.Френкель, *Кинетическая теория жидкостей, «Наука», М.-Л.*, (1975) 182.

ALKANLARIN MÜXTƏLİF TEMPERATURLARDA BUXARLANMA İSTİLİYİ

Ə.H. ƏHMƏDOV

Normal və izo-alkanların buxarlanma istiliyini hesablamaq üçün V.M.Tatevski nəzəriyyəsi tətbiq edilib. Müxtəlif temperaturlarda alkanların buxarlanma istiliyi tədqiq olunmuşdur. Alkanların buxarlanma istiliyini müxtəlif temperaturlarda hesablamaq üçün düstur təklif olunmuşdur.

HEAT OF VAPORIZATION OF ALKANES AT DIFFERENT TEMPERATURES

A.H.AHMADOV

To calculate the heat of vaporization of normal and iso-alkanes, we have applied the theory of V.M.Tatevski. It has been investigated the heat of vaporization of alkanes at different temperatures. The formula has been offered for calculating the heat of vaporization of alkanes at various temperatures.

Редактор:Э.Масимов

УДК 621.315.592

ВЛИЯНИЕ ВАКАНСИЙ СЕРЫ НА ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛОВ TlInS_2

Р.С.МАДАТОВ, А.И.НАДЖАФОВ, М.А.МАМЕДОВ

*Институт Радиационных Проблем НАН Азербайджана
AZ 1141, г.Баку, ул. Ф.Агаева, 9
msrahim@rambler.ru*

поступила 30.05.2011
принята к печати 25.06.2011

РЕФЕРАТ

Исследовалось влияние обработки в парах серы на фотопроводимость гексагонального кристалла TlInS_2 для выявления корреляции между анионной вакансией серы и фотопроводимостью. Установлена корреляция фотопроводимости с концентрацией вакансий серы и найдено, что при уменьшении концентрации вакансий серы фотопроводимость в собственной и УФ областях спектра увеличивается. Предполагается, что рост фотопроводимости обусловлен «залечиванием» анионной вакансии в парах серы, приводящей к образованию глубоких компенсированных акцепторов, являющихся центрами рекомбинации.

Ключевые слова: фотопроводимость, дефекты, отжиг, поглощение света, пары Френкеля, комплексы.

ВВЕДЕНИЕ

В литературе имеются данные о значительной концентрации дефектов в анионной подрешетке тройных халькогенидов типа $\text{A}^3\text{B}^3\text{C}^6_2$ [1-3]. Этот факт особенно относится к сульфидам выше указанных соединений. Соединение TlInS_2 является одним из немногих полупроводниковых соединений, в кристаллах моноклинной модификации которого наблюдается последовательность несоответствующих и сегнетоэлектрических фазовых переходов [3-5]. В этих работах авторы пришли к выводу, что вакансии, имеющиеся в анионной подрешетке указанных соединений, должны отражаться на особенностях электропроводности в температурной области 170÷220К, а также на фотоэлектрических свойствах. Наибольшая концентрация указанных структурных дефектов имеет место в гексагональном TlInS_2 , полученным методом направленной кристаллизации. Это обуславливает сравнительно слабую фоточувствительность TlInS_2 в собственной и УФ-областях спектров. Однако в литературе отсутствуют целенаправленные исследования, посвященные влиянию разного рода структурных дефектов (вакансий) на фотоэлектрические свойства гексагональной модификации TlInS_2 . Для установления корреляции между фотопроводимостью и концентрацией структурных дефектов осуществляли отжиг исходных кристаллов гексагонального TlInS_2 в парах серы в вакуумированных ампулах.

Целью данной работы является исследование характера изменений фотопроводимости гексагонального TlInS_2 в результате обработки в парах серы.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для исследования были выращены монокристаллы гексагональной модификации TlInS_2 из монокристаллов моноклинной путем отжига при 650К в течение 30 дней и подвергнутых зонной очистке при температуре 1060±3К. Полученные кристаллы имели проводимость n-типа и обладали удельным сопротивлением 1÷6·10⁶ Ом·см. Параметры элементарной ячейки полученных кристаллов имеют следующие значения: $a=3.82\text{Å}$, $c=14.85\text{Å}$. Кристаллы имели

зеркальную поверхность скола и легко скалывались по базисной плоскости. Кристаллы имели темно-серый цвет с металлическим блеском. В качестве омических контактов использовался индий. Расстояние между электродами $L=0,5\text{мм}$. Измерения проводились в направлении параллельно оси „С” кристалла.

Для получения образцов кристаллов TlInS_2 с различной концентрацией вакансий монокристаллы отжигали в атмосфере паров серы. Для этого, исходные образцы и кристаллы элементарной серы помещали в кварцевую ампулу с известным внутренним объемом, ампулу откачивали до остаточного давления 10^{-2} Па, запаивали и помещали в печь. Количество серы для получения необходимого давления её паров при заданной температуре определяли по уравнению Клапейрона–Менделеева с учетом числа атомов в молекуле (S_6 при $T=800\pm 10\text{K}$) [6]. В результате проведенных экспериментов были установлены оптимальные условия отжига в парах серы, обеспечивающие максимальную фотопроводимость при комнатной температуре: $p=0,06\div 0,10\text{МПа}$, $T=773\div 823\text{K}$ и $\tau=(7,20\div 7,92)\cdot 10^4\text{сек}$. Также было установлено, что при давлении паров серы меньше $0,06\text{МПа}$ продолжительность отжига увеличивается, а при более высоких давлениях поверхность кристалла заметно ухудшается.

Измерения оптических величин проводились в режиме модуляции светового потока с частотой 20Гц . В качестве монохроматора использовали МДР-23. Регистрация сигнала осуществлялась в режиме синхронного детектирования. Источником света служила ксеноновая лампа ДКСЛ-1000, спектральное распределение которой было определено как число квантов, падающих на единицу поверхности в единицу времени. Измерения зависимости коэффициента поглощения α и фотопроводимости $\Delta\sigma$ от энергии фотонов проводились при температуре 293K . Для сравнения фоточувствительности образцов находилась спектральная зависимость квантовой эффективности η , определенная как величина фототока, приходящаяся на один квант света, падающего на образец в секунду

$$\eta = \Delta U / R_{\text{нагр}} \cdot N \cdot S \cdot U, \quad (3.5)$$

где ΔU - величина сигнала фотопроводимости, $R_{\text{нагр}}$ - величина нагрузочного сопротивления, N - количество квантов, падающих в единицу времени на единицу площади образца, S - площадь поверхности образца, U - напряжение на образце.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На Рис.1 показана зависимость фотопроводимости (кривая 2) и коэффициента поглощения (кривая 1) исходных кристаллов гексагонального TlInS_2 от энергии фотонов. По зависимости коэффициента поглощения от энергии квантов определена ширина запрещенной зоны: $E_g \approx 0,95\text{эВ}$. Из рисунка (кр.2) видно, что при увеличении энергии фотонов от $0,9\text{эВ}$ до $1,1\text{эВ}$ фотопроводимость увеличивается, и максимум фотопроводимости имеет место при энергии фотонов $\approx 1,1\text{эВ}$.

На Рис.2 показана зависимость собственного фототока от температуры. Как видно из рисунка (кривая 1), с ростом температуры до 180K фототок в исходном материале постепенно увеличивается, а далее в интервале $180\div 250\text{K}$ наблюдается спад фототока. После отжига образцов при 800K в парах серы (Рис.2, кр.2) максимум фототока смещается в высокотемпературную область, и в области $200\div 250\text{K}$ наблюдается участок температурного гашения фототока. Оказалось, что при этом температура гашения фототока смещается в высокотемпературную область, и величина фототока увеличивается с ростом интенсивности освещенности. Такое изменение чувствительности связано, в основном, с перестройкой собственных дефектных уровней в запрещенной зоне и изменением степени дырочного заполнения центров чувствительности в TlInS_2 . Исходя из

предложенной рекомбинационной схемы [7], можно объяснить температурную зависимость фототока. Следовательно, можно считать, что возрастание фототока обусловлено влиянием уровней прилипания на время жизни неравновесных дырок. При $T > 110\text{K}$ γ -центры, являясь уровнями прилипания для электронов, не участвуют в рекомбинации. Поскольку скорость термической ионизации электронов из γ -центров в s -зону и скорость захвата из s -зоны на γ одинакова, с понижением температуры переход электронов из γ в s -зону уменьшается, и через γ -уровни начинается рекомбинация дырок. Электроны, которые раньше захватывались на s -центры, теперь переходят на γ -центры. При этом увеличивается время жизни дырок и возрастает фототок.

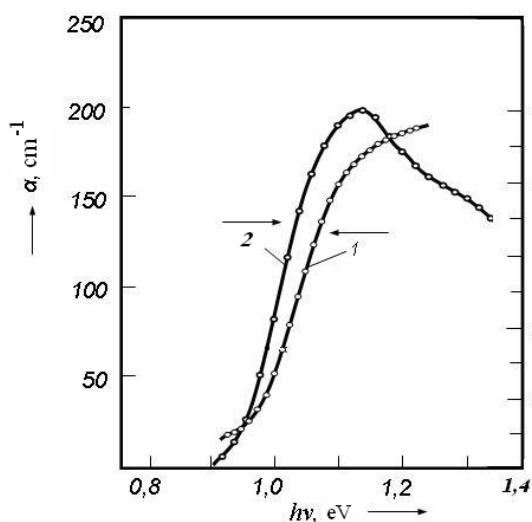


Рис.1.

Зависимости коэффициента поглощения α (кривая 1) и фотопроводимости $\Delta\sigma$ (кривая 2) от энергии фотонов для образцов TlInS_2 гексагональной модификации при $T=293\text{K}$.

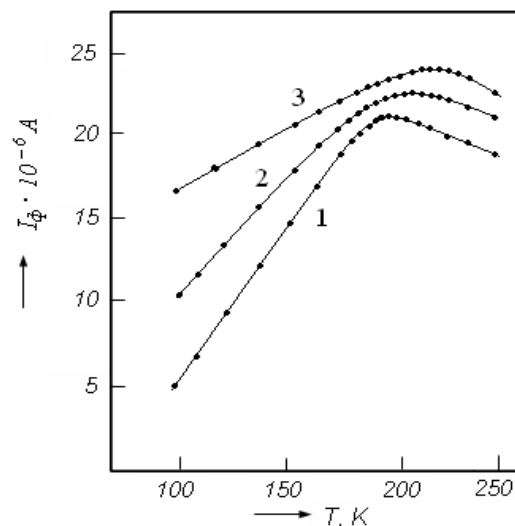


Рис.2.

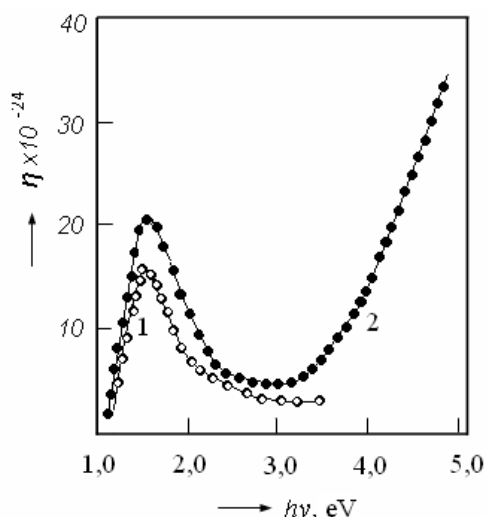
Температурные зависимости фотопроводимости исходных (кривая 1) и отожженных в течение $7,2 \cdot 10^4$ сек при $T=800 \pm 10\text{ K}$ в парах серы (кривые 2 – 3) кристаллов гексагонального TlInS_2 при интенсивности фотовозбуждения $2 \cdot 10^3 \text{ лк}$ (1), $2 \cdot 10^3 \text{ лк}$ (2), $15 \cdot 10^3 \text{ лк}$ (3).

В исходных кристаллах, как следует из Рис.2 (кр.1), в области температур $T > 200\text{K}$ наблюдается ТГФ в связи с развитием термической генерации электронов из γ -уровней в s -зону и последующим захватом их на s -уровни. При понижении температуры ниже 200K фототок падает, что показывает локализацию дырок на t -уровнях, а соответствующих электронов на γ -уровнях рекомбинации. При выполнении условия $N_r = N_t$, согласно [7], происходит уменьшение времени жизни дырок и фототока.

Термическая активация фототока в области гашения фототока находит удовлетворительное объяснение в рамках трехуровневой схемы рекомбинации, содержащей быстрые (s) уровни захвата неравновесных носителей заряда, медленные очувствляющие (γ) уровни рекомбинации и (t) –уровни прилипания для неравновесных носителей заряда [8]. При нагревании образца от 100 до 180K наблюдается увеличение значений фотопроводимости. После стабилизации при $180 \div 210\text{K}$ значения фототока снова уменьшаются в интервале $210 \div 250\text{K}$. Из аналогичной зависимости для отожженных в парах серы кристаллов TlInS_2 при различных интенсивностях возбуждения белым светом (Рис.2, кр.2,3) видно, что в результате отжига ТГФ ослабляется. Более того, значение фотопроводимости отожженных кристаллов в парах серы растет с повышением температуры, а

скорость роста фототока и температура гашения зависят от интенсивности фотовозбуждения.

Сказанное подтверждается спектральной зависимостью квантовой эффективности фотопроводимости в диапазоне $1,0 \div 5,0$ эВ исходных и отожженных в парах серы в течение $7,2 \cdot 10^4$ сек при $p=0,08$ МПа и $T=800 \pm 10$ К кристаллов гексагонального $TlInS_2$ (Рис.3). Как видно из кривой 1 (десятикратное увеличение), фототок в образцах для фотонов с энергией $h\nu > 3,5$ эВ отсутствует. Кривая 2 (Рис.3) относится к кристаллам $TlInS_2$, отожженным в парах серы при давлении $p=0,08$ МПа в течении $7,2 \cdot 10^4$ сек. Как видно из сравнения кривых 1 и 2, в результате обработки в атмосфере серы квантовая эффективность фотопроводимости в



области энергий фотонов $h\nu = E_g$ возрастает $\sim 1,5$ раза, и появляется фото-чувствительность в ультрафиолетовой области $3,5 \div 6,0$ эВ, которая по значению η превышает фоточувствительность при $h\nu = E_g$. По всей вероятности, отсутствие фотопроводимости в УФ области в исходных кристаллах гексагонального $TlInS_2$ связано с наличием в них вакансий серы, которые „залечиваются” после отжига кристаллов в атмосфере паров серы.

Рис. 3.

Спектральная зависимость квантовой эффективности гексагонального кристалла $TlInS_2$. 1-исходный материал, 2-после отжига в парах серы в течение $7,2 \cdot 10^4$ сек. при $T=800 \pm 10$ К.

С помощью сравнительного анализа температурной и спектральной зависимостей фотопроводимости исследовано влияние вакансий серы на фотопроводимость гексагонального кристалла $TlInS_2$. Установлено, что в результате отжига в парах серы, в полученных из расплава кристаллах $TlInS_2$ ослабляется эффект температурного гашения фотопроводимости, обусловленный наличием в исходных кристаллах дефектов в подрешетке серы. Устранение указанных дефектов в парах серы сопровождается увеличением заполнения ловушек и времени жизни фотовозбужденных носителей, что приводит к росту фотопроводимости в области края УФ области. На основе результатов проведенных исследований разработан способ получения фоточувствительных монокристаллов гексагонального $TlInS_2$, позволяющий использовать полученные материалы в качестве фотоприемников ультрафиолетового излучения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом на основе экспериментальных данных показана возможность снижения центров рекомбинации, в частности, при отжиге в парах серы монокристаллов гексагонального $TlInS_2$ за счет уменьшения числа вакансий, приводящего к залечиванию указанных дефектов.

Предложена трехуровневая модель, в рамках которой описывается как возрастание фоточувствительности в коротковолновой, так и ее проявление в ультрафиолетовой областях спектра.

Полученные материалы на основе монокристалла гексагонального $TlInS_2$ могут быть использованы в качестве фотоприемников в УФ области спектра $3,5 \div 6,0$ эВ.

1. А.З.Абасова, *Эффекты в монокристаллах слоистых полупроводников A^3B^6 , $A^3B^3C^6_2$ и фоточувствительных структурах на их основе*, Дисс. на соискание степени док. физ.-мат. наук., (1986) 350.
2. А.З.Абасова, Ф.А.Зайтов, В.И.Стафеев, В.Н.Чкунина, *Изменение фотоэлектрических свойств монокристаллов $p\text{-TlInSe}_2$ под действием γ -облучения*, Тезисы докладов всесоюзной конференции «Тройные полупроводники и их применение», Кишинев, июнь, (1983) 6-8.
3. Р.М.Сардарлы, О.А.Самедов, И.Ш.Садыхов, *Влияние различных типов дефектов на сегнетоэлектрические свойства политипных модификаций кристалла TlInS_2* , Тезисы докладов XII Всесоюзной конференции по физике сегнетоэлектриков, Ростов-на-Дону, **3** (1989) 50.
4. Р.А.Сулейманов, М.Ю.Сеидов, В.Ф.Салаев, Ф.А.Микайлов, *Модель последовательности структурных фазовых превращений в слоистом кристалле TlInS_2* , ФТТ, **35** (1993) 348-354.
5. А.У.Шелег, О.Б.Плющ, В.А.Алиев, *Рентгенографические исследования несоизмеримой фазы в кристаллах $\beta\text{-TlInS}_2$* , ФТТ, **36** (1994) 226-230.
6. Ф.Крегер, *Химия несовершенных кристаллов*, М., Изд-во «МИР», (1969) 654.
7. В.А.Алиев, *Реальная структура, фотоэлектрические явления и фазовые превращения в кристаллах TlA^3B^6_2* , Автореферат дисс. на соискание степени док. физ.-мат. наук. Баку, (1997), 37.
8. В.Е.Лашкарев, А.В.Любченко, М.К.Шейнкман, *Неравновесные процессы в фотопроводниках*, Киев, «Наукова думка», (1981) 264.

KÜKÜRD VAKANSİYALARININ HEKSAQONAL TlInS_2 KRİSTALLARININ FOTOKEÇİRİCİLİYİNƏ TƏSİRİ

R.S.MƏDƏTOV, A.İ.NƏCƏFOV, M.Ə.MƏMMƏDOV

Kükürdün anion vakansiyaları ilə fotokeçiricilik arasındakı korrelyasiyanı aşkar etmək üçün heksaqonal TlInS_2 kristallarının fotokeçiriciliyinə kükürd buxarında dəmləmənin təsiri öyrənilmişdir. Fotokeçiriciliyin kükürd vakansiyalarının konsentrasiyası ilə əlaqədar korrelyasiya müəyyən edilmişdir və məlum olmuşdur ki, kükürd vakansiyalarının konsentrasiyası azaldıqda ultrabənövşəyi oblastda fotokeçiricilik artır. Fərz edilir ki, fotokeçiriciliyin artması anion vakansiyalarının kükürd buxarında bərpa olunması hesabına baş verir.

INFLUENCE OF SULFUR VACANCIES ON THE PHOTOCONDUCTIVITY OF HEXAGONAL CRISTALS TlInS_2

R.S.MADATOV, A.I.NAJAFOV, M.A.MAMEDOV

The processing influence in vapor of sulfur on photoconductivity of hexagonal crystal TlInS_2 for detection of correlation between anionic vacancy of sulfur and photoconductivity has been researched. It has been assigned correlation of photoconductivity with concentration of sulfur vacancy and has been found that while concentration of sulfur vacancy decreases, the photoconductivity in inherent and UF spectral field increases. It has been supposed that "healing" of anionic vacancy in sulfur vapors has led to formation of deeply compensated acceptors, being recombination centers that has led to the growth of photoconductivity.

Редактор: С.Мустафаева

УДК 537.311.322; 539.213

ИНЖЕКЦИОННЫЕ ТОКИ В ХАЛЬКОГЕНИДНОМ СТЕКЛООБРАЗНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ $\text{Se}_{95}\text{As}_5$, СОДЕРЖАЩЕМ ПРИМЕСИ EuF_3

**А.И.ИСАЕВ, С.И.МЕХТИЕВА, С.Н.ГАРИБОВА, В.З.ЗЕЙНАЛОВ,
М.М.СЕИДОВ**

*Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, г.Баку, пр.Г.Джавида, 33
sqaribova@rambler.ru*

поступила: 12.04.2011
принята к печати: 04.06.2011

Ключевые слова: Халькогенидные стеклообразные полупроводники, аморфные полупроводники, инжекционные токи, редкоземельные примеси, электрические свойства.

РЕФЕРАТ

Установлено, что перенос носителей заряда (дырок) в структуре $\text{Al-Se}_{95}\text{As}_5<\text{EuF}_3>\text{-Te}$ осуществляется по механизму токов монополярной инжекции, ограниченных пространственными зарядами, при участии двух групп ловушек захвата - мелких (E_t , E_{t1}) и глубоких (E_{t2}). Определены концентрация и энергетическое расположение выявленных ловушек. Показано, что примеси EuF_3 сильно влияют на концентрацию ловушек захвата, причем, в основном, влияют на глубокие ловушки, расположенные около уровня Ферми.

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 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, проявляющихся в виде заряженных центров. Это позволяет существенно улучшить параметры переноса электрического заряда и фоточувствительность [4-9].

Использование фторида редкоземельного элемента (EuF_3) в качестве примеси обусловлено двумя особенностями атомов, входящих в состав указанной молекулы. Во-первых, они проявляются, в основном, в виде заряженных центров (ионы Eu^{3+} и F^-) и должны влиять на концентрацию U-центров. Во-вторых, атомы РЗЭ в запрещенной зоне ХСП создают состояния, обусловленные их 4f-состояниями, вследствие чего оптическая ширина запрещенной зоны ХСП перекрывается по энергии электронными переходами, разрешенными для иона РЗЭ (Eu), что должно приводить к существенному изменению его оптических, фотоэлектрических и электрических свойств [7-10]. Понимание механизма электронных процессов, ответственных за вышеперечисленные особенности требует комплексного исследования структуры и физических свойств, с целью определения энергетического спектра локализованных состояний в запрещенной зоне ХСП и установления механизма влияния на них ионов РЗЭ, для которых

одним из достоверных методов является исследование токов, ограниченных пространственными зарядами (ТОПЗ), чему и посвящена настоящая работа.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И ИЗГОТОВЛЕНИЕ ОБРАЗЦОВ

Синтез ХСП состава Se₉₅As₅ с примесью EuF₃ осуществлялся сплавлением соответствующих количеств химических элементов особой чистоты в вакуумированных до 10⁻⁶ мм.рт.ст. кварцевых ампулах при температуре выше 900⁰С во вращающейся печи с последующим охлаждением в режиме выключенной печи. Примесь вводилась в процессе синтеза, концентрация ее лежала в пределах 0,01÷1 ат%.

Вольтамперные характеристики (ВАХ) измерены в стационарном режиме по стандартной методике. Измерения выполнялись на автоматизированной установке Keithley 6487. Образцы представляли собой «сэндвич» с алюминиевыми и теллуровыми электродами и изготовлялись методом термического испарения в вакууме ~10⁻⁶ мм.рт.ст. Толщина пленок измерялась интерферометрическим методом и варьировалась в диапазоне 1÷10 мкм. ВАХ структуры Al-Se₉₅As₅<EuF₃>-Te с примесью EuF₃ исследовались при приложении электрического напряжения обеих полярностей. Режим ТОПЗ наблюдается при приложении к Те положительного потенциала, а при обратной полярности наблюдается ВАХ N-типа.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На Рис.1 показаны ВАХ структуры Al-Se₉₅As₅<EuF₃>-Te при приложении к Те положительного (Рис.1а), и отрицательного (Рис.1б) потенциалов при комнатной температуре. На Рис.1а также представлены ВАХ структуры Al-аморфный селен-Те. Как видно, в двойном логарифмическом масштабе ВАХ состоит из нескольких отчетливо выраженных прямолинейных участков, соответствующих степенным зависимостям тока (I) от приложенного напряжения (V). В большинстве образцов при малых напряжениях наблюдается зависимость $I \sim V^n$ ($n \leq 1$). Далее наблюдается зависимость $I \sim V^n$, где n в разных участках ВАХ получает разные значения, что свидетельствует о том, что перенос носителей заряда (дырок) в указанной структуре осуществляется по механизму токов монополярной инжекции, ограниченных пространственными зарядами (ТОПЗ) при участии ловушек захвата носителей заряда. Исследования показали, что напряжение, при котором начинается сверхлинейная зависимость силы тока от напряжения, квадратично зависит от толщины образца, что еще раз доказывает осуществления механизма ТОПЗ. Как видно из Рис.1а, ВАХ аморфного селена при малых значениях приложенного напряжения подчиняется омическому закону и с ростом напряжения переходит в квадратичный, после чего ток начинает круто возрастать с увеличением приложенного напряжения, наблюдается участок называемый «полным заполнением ловушек» [11]. Далее этот участок сменяется участком, в котором проявляется квадратичная зависимость тока от напряжения, $I \sim V^2$. Такое поведение ВАХ соответствует механизму ТОПЗ, контролируемому мелкими ловушками [11]. ВАХ структуры Al-Se₉₅As₅<EuF₃>-Te отличается от ВАХ аморфного селена тем, что после участка, подчиняющегося омическому закону, идет участок, соответствующий степенному закону, т.е. $I \sim V^n$, где n превышает 2. Далее наблюдается участок, где $I \sim V^2$. Наконец квадратичный участок сменяется участком, в котором наблюдается область более сильного возрастания тока, чем квадратичная. Здесь возрастание тока с напряжением описывается зависимостью, близкой к экспоненциальной, что обычно связывается с ионизацией локальных

центров [12]. Особенности ВАХ исследованных нами структур $\text{Al-Se}_{95}\text{As}_5\langle\text{EuF}_3\rangle\text{-Te}$ свидетельствуют о том, что в указанном материале перенос электрического заряда контролируется несколько группами ловушечных центров захвата, расположенных по разные стороны от уровня Ферми. Одновременно с этим, значения напряжений, при которых наблюдается участок, соответствующий резкому возрастанию тока, т.е. режиму соответствующему предельному заполнению ловушек, смещается к высоким напряжениям, что свидетельствует об увеличении концентрации локальных состояний, являющихся ловушками захвата основных носителей заряда. Примеси EuF_3 довольно сложно влияют на формы ВАХ и на значения переходного напряжения между различными участками.

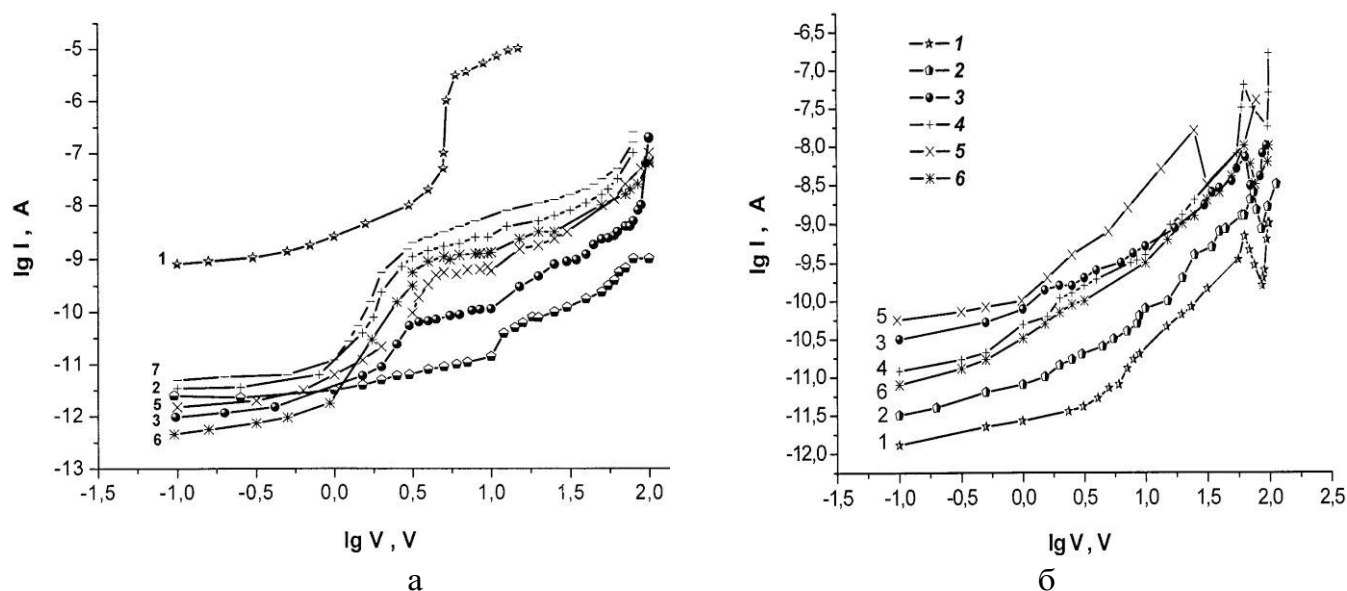


Рис.1.

Вольтамперная характеристика аморфного селена и структуры $\text{Al-Se}_{95}\text{As}_5\langle\text{EuF}_3\rangle\text{-Te}$ при приложении к Те при $T \approx 300\text{K}$: а - положительного потенциала: 1-Se, 2- $\text{Se}_{95}\text{As}_5$, 3 - $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.005}$, 4- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.01}$, 5- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.1}$, 6- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.5}$, 7- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_1$; б – отрицательного потенциала: 1- $\text{Se}_{95}\text{As}_5$, 2- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.005}$, 3- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.01}$, 4- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.1}$, 5- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.5}$, 6- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_1$.

Влияние химического состава и примесей EuF_3 на поведение ВАХ позволяет высказать некоторые соображения о природе локальных состояний и их энергетическом расположении в запрещенной зоне относительно равновесного положения уровня Ферми, контролирующего прохождение тока в исследуемых материалах. В аморфном селене ловушки захвата основных носителей заряда (дырки) являются мелкими, т.е. находятся ниже равновесного значения уровня Ферми [14]. Предполагается, что в аморфном селене локальные состояния, контролирующие ВАХ, связаны с заряженными собственными дефектами C_1^- , обусловленными оборванными связями селена. Предполагается, что в системе $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ наряду с дефектами типа C_1^- существуют заряженные собственные дефекты P_2^- , создаваемые атомами мышьяка с нарушенной координацией. О возможности существования таких дефектов в ХСП, содержащих мышьяк, также сообщалось в работе [13]. Согласно форме ВАХ энергетическое положение локальных состояний, соответствующих указанным дефектам, должно находиться выше уровня Ферми, являясь тем самым глубокими [14].

При низких напряжениях, дырки, инжектируемые в $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ из теллурического контакта, захватываются глубокими ловушками (E_{t2}), но благодаря присутствию равновесных дырок проводимость остается омической. С увеличением напряжения происходит заполнение центров E_{t2} и одновременно увеличивается концентрация

свободных дырок и как только концентрация инжектированных свободных дырок превышает концентрацию равновесных дырок, ток резко возрастает с увеличением напряжения, т.е. наблюдается так называемый участок «предельного заполнения ловушек». После этого ток контролируется ловушками (E_t и E_{t1}), при этом пока квазиуровень Ферми остается выше этих уровней, наблюдается ловушечный квадратичный закон. Увеличение крутизны ВАХ на последнем участке, по-видимому, связано с термополевой эмиссией дырок с уровней ловушек. В пользу последнего свидетельствует еще тот факт, что при обратной полярности приложенного напряжения, когда режим ТОПЗ не наблюдается при тех же значениях напряженности приложенного поля, происходит резкий рост тока, что также связано полевым опустошением ловушек (Рис.1б).

Используя известные теории ТОПЗ [14], определили некоторые параметры, характеризующие перенос электрического заряда в системе Se₉₅As₅, а также параметры ловушек захвата дырок.

Таблица.

Значения некоторых параметров ХСП системы Se₉₅As₅, содержащей примеси EuF₃.

	$p_0, \text{см}^{-3}$	$F_0 - E_v, \text{эВ}$	$p_{t02}, \text{см}^{-3}$	$E_{t2}, \text{эВ}$	$E_{t1}, \text{эВ}$	$N_t, \text{см}^{-3}$	$E_t, \text{эВ}$
Se ₉₅ As ₅	$0.3 \cdot 10^4$	0.95	$4 \cdot 10^{14}$	1.023	0.27	$8 \cdot 10^{17}$	0.687
Se ₉₅ As ₅ (EuF ₃) _{0.005}	$0.32 \cdot 10^4$	0.95	$8 \cdot 10^{13}$	1.05	0.25	$7 \cdot 10^{17}$	0.69
Se ₉₅ As ₅ (EuF ₃) _{0.01}	$1.4 \cdot 10^4$	0.9	$5.99 \cdot 10^{13}$	1.07	—	$2.8 \cdot 10^{17}$	0.672
Se ₉₅ As ₅ (EuF ₃) _{0.1}	$0.85 \cdot 10^4$	0.92	$6 \cdot 10^{13}$	1.065	0.26	$2 \cdot 10^{17}$	0.686
Se ₉₅ As ₅ (EuF ₃) _{0.5}	$1.3 \cdot 10^4$	0.91	$4.028 \cdot 10^{13}$	1.07	0.26	$3.9 \cdot 10^{17}$	0.69
Se ₉₅ As ₅ (EuF ₃) ₁	$0.7 \cdot 10^4$	0.94	$4.028 \cdot 10^{13}$	1.096	0.26	$4.9 \cdot 10^{17}$	0.686

Из омического участка ВАХ вычислили удельное сопротивление пленки и, используя эти значения, оценили концентрацию равновесных свободных дырок (Таблица) из формулы $\rho = (ep_0\mu)^{-1}$, где e - элементарный заряд и μ - подвижность свободных носителей в разрешенной зоне $\mu = 10 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ [15]. Используя эти данные, по формуле

$$p_0 = N_v \exp \left(- \frac{F_0 - E_v}{kT} \right) \quad (1)$$

определили положение уровня Ферми в запрещенной зоне ($F_0 - E_v$) (Таблица), где N_v - эффективная плотность состояний в валентной зоне, kT - тепловая энергия. При вычислениях значения берутся из [15], откуда $N_v = 10^{20} \text{ см}^{-3}$.

Концентрация (p_{t02}) первоначально незанятых дырками ловушек с энергией E_{t2} вычислена из уравнения

$$V_{\text{ФСТ}} = \frac{ep_{t02}L^2}{\varepsilon} \quad (2)$$

и значения представлены в Таблице, где $V_{\text{ФСТ}}$ - напряжение, при котором начинается участок полного заполнения ловушек E_{t2} . Как видно из Таблицы, $p_{t02} \gg p_0$. Как уже было отмечено выше, глубокие уровни в исследуемых материалах связаны с $D^-(P_2^-)$. Принимая концентрацию P_2^- центров (N_{t2}) порядка 10^{16} см^{-3} , по формуле

$$p_{t02} = \frac{N_{t2}}{1 + g_A \exp \left(\frac{E_{t2} - F_0}{kT} \right)} \approx \frac{N_{t2}}{g_A} \exp \left(\frac{F_0 - E_{t2}}{kT} \right) \quad (3)$$

вычислено энергетическое положение уровня E_{t2} (Таблица). В формуле (3) g_A -

коэффициент спинного вырождения уровня E_{t2} , который считается равным двум ($g_A=2$).

Как видно из Рис.1а, при напряжениях, превышающих $10\div 20$ В наблюдается квадратичная зависимость тока от напряжения, т.е. ВАХ подчиняется закону

$$I = \frac{\theta e \mu V^2}{L^3} \quad (4)$$

Уравнение (4) называется ловушечным квадратичным законом и отличается от закона Мотта-Герни или от безловушечного квадратичного закона для идеального диэлектрика наличием множителя θ , характеризующего долю свободных носителей от всех инжектированных

$$\theta = \frac{N_c}{gN_t} \exp \frac{E_t - E_c}{kT} \quad (5)$$

Согласно [15], при этом на ток влияет только один дискретный уровень. Если имеется несколько групп мелких уровней прилипания, что следует ожидать в ХСП материалах содержащих примеси атомов РЗЭ, то группа с наименьшим значением θ наиболее сильно ограничивает ток, и в (4) входит параметр θ , связанный именно с этой группой. На Рис.2 показана температурная зависимость θ , вычисляемая в районе ВАХ, подчиняющаяся ловушечному квадратичному закону, из которого определены энергия активации (E_t) и концентрация мелких ловушек (N_t), результаты которых представлены в Таблице. Как видно из таблицы, энергия активации уровней прилипания для всех образцов почти одинакова и составляет $0,68\div 0,69$ эВ. Однако примеси EuF_3 сложно влияют на концентрацию ловушечных

состояний: малые концентрации примесных атомов (до 0,1ат%) их уменьшают, а большие - увеличивают. Аналогичным образом примеси галогенов влияют на дрейфовую подвижность носителей заряда, что успешно объясняется в рамках модели заряженных собственных дефектов[5-6].

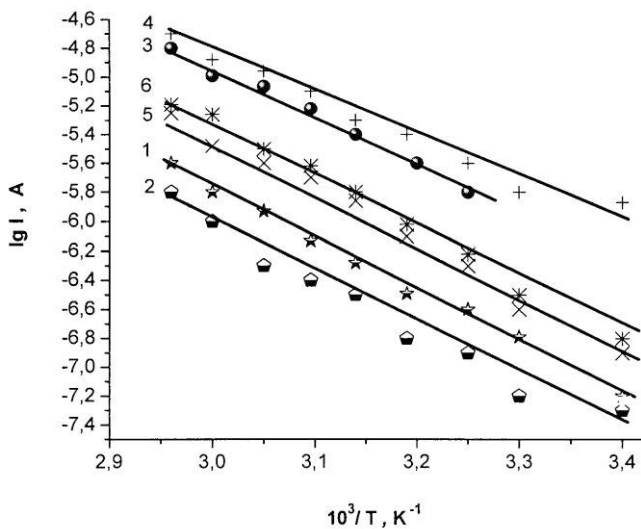


Рис 2.

Температурная зависимость параметра θ , вычисленного в районе ВАХ, подчиняющейся ловушечному квадратичному закону: 1 - $\text{Se}_{95}\text{As}_5$, 2- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.005}$, 3- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.01}$, 4- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.1}$, 5- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_{0.5}$, 6- $\text{Se}_{95}\text{As}_5(\text{EuF}_3)_1$.

Принимая, что на участке, где начинается ловушечный квадратичный закон (ЛКЗ), квазиуровень Ферми для дырок (F) с точностью до kT совпадает с E_{t1} , из уравнения

$$E_{t1} - F_0 \approx F - E_v = kT \ln \frac{N_v}{P_{\text{FCT}}} \quad (6)$$

оценили энергетическое положение уровня E_{t1} , где p_{FCT} - концентрация свободных дырок, инжектированных в образец при напряжении, соответствующем началу участков ЛКЗ (V_{FCT}).

Значение P_{FCT} вычислено из формулы

$$V_{\text{FCT}} = \frac{e p_{\text{FCT}} L^2}{\varepsilon} \quad (7)$$

Результаты оценки E_{t1} также представлены в Таблице, из которой видно, что энергетическое положение E_{t1} уровня соответствует энергии активации дрейфовой подвижности дырок в аморфном селене, что также свидетельствует о связи указанных состояний заряженными собственными дефектами C_1^- , обусловленными оборванными связями селена. Этот факт позволяет за концентрацию центров с энергией $E_{t1}(N_{t1})$ принять значение 10^{19}см^{-3} [15], соответствующее плотности локализованных состояний, контролирующих дрейфовую подвижность дырок. Таким образом, из анализа ВАХ в $\text{Se}_{95}\text{As}_5\langle\text{EuF}_3\rangle$ выявлены три группы локализованных состояний, параметры которых представлены в Таблице. Одна из них - глубокие (E_{t2}) находятся выше уровня Ферми, а две мелкие (E_t и E_{t1}) лежат ниже этого уровня.

Влияние примесей EuF_3 на ВАХ можно объяснить, если привлечь представления, развитые в рамках модели заряженных собственных дефектов [15]. Согласно этой модели перенос носителей заряда в ХСП контролируется U^- -центрами, представляющими собой заряженные дефекты D^+ и D^- , которые образуются из исходных нейтральных дефектов D^0 по реакции



где D^+ и D^- - центры, являющиеся ловушками для электронов и дырок. Предполагается, что роль D^- -центров в нашем случае играют центры C_1^- и P_2^- , связанные с оборванными связями селена и атомами мышьяка с нарушенной координацией, соответственно.

При введении в ХСП положительно заряженной примеси A^+ (предполагается, что европий, в основном, проявляется в виде положительно заряженного иона Eu^{+3}) должен выполняться закон электронейтральности

$$[A^+] + [D^+] = [D^-]. \quad (9)$$

Согласно закону действующих масс количественное соотношение между концентрациями заряженных центров определяется выражением

$$[D^+] [D^-] = [D^0]^2 = \text{const}. \quad (10)$$

Согласно (9) и (10), при введении положительно заряженной A^+ примеси, концентрация D^+ -центров должна уменьшаться, а концентрации D^- -центров увеличиваться, что должно влиять на механизм токопрохождения. Если принять, что перенос дырок в $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ контролируется локальными состояниями, связанными D^- -центрами, то можно объяснить изменения, происходящие в ВАХ при изменении концентрации молекулы EuF_3 . Действительно, при относительно больших концентрациях европия (0,5÷1 ат%) напряжение, при котором наблюдается участок, соответствующий предельному заполнению ловушек, перемещается в сторону высоких значений приложенного напряжения, что свидетельствует о росте концентрации ловушек захвата дырок. Влияния примесей EuF_3 на ВАХ при малых концентрациях не происходит в рамках модели заряженных собственных дефектов, т.е. в результате участия примеси EuF_3 уменьшается концентрация как глубоких, так и мелких состояний. Такое же влияние на D^+ и D^- -центры оказывают и примеси галогенов, т.е. примеси галогенов в малых концентрациях уменьшают концентрации собственных дефектов обоих знаков [13]. Аналогичное влияние наблюдается и в настоящей работе, и, по-видимому, также обусловлено химической активностью ионов РЗЭ и фтора, способных образовать химические соединения с селеном и мышьяком, в результате чего уменьшается концентрация исходных собственных дефектов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведенных исследований установлено, что перенос носителей заряда (дырок) в структуре $\text{Al-Se}_{95}\text{As}_5\langle\text{EuF}_3\rangle\text{-Te}$ осуществляется по механизму

токов монополярной инжекции, ограниченных пространственными зарядами, при участии трех групп ловушек захвата: мелкие (E_t и E_{t1}), соответствующие основному E_t и возбужденному E_{t1} состояниям заряженных собственных дефектов C_1^- , обусловленных оборванными связями селена и глубокими E_{t2} , соответствующими также заряженным собственным дефектам P_2^- , создаваемыми атомами мышьяка с нарушенной координацией. Показано, что примеси EuF_3 , в основном, влияют на концентрацию ловушек захвата, а их энергетическое положение остается неизменным и не зависит от концентрации вводимых примесей. Малые содержания примеси EuF_3 (до 0,1ат%) уменьшают концентрации глубоких ловушек, а большие - (больше чем 0,1ат%) увеличивают их. Поведение примеси EuF_3 в малых концентрациях объяснено химической активностью ионов РЗЭ и фтора, способных образовать химические соединения с селеном и мышьяком, в результате чего уменьшается концентрация исходных собственных дефектов. Поведение примеси EuF_3 в больших концентрациях происходит согласно модели заряженных собственных дефектов [15], т. е. если принять, что примеси РЗЭ, в основном, проявляются в виде положительно заряженных ионов, то в результате их присутствия концентрация U^- -центров должна претерпевать изменения - D^+ -центры должны уменьшаться, а D^- -центры увеличиваться, что действительно и наблюдалось.

1. К.Д.Цендин, *Электронные явления в халькогенидных стеклообразных полупроводниках*, Санкт – Петербург, Наука, (1996) 320.
2. Tanaka Keiji, *Nonlinier Optics in Glasses: How can we analyze? Book of Abstracts 7th Int. Conf. On Solid State Chemistry. Czech Rep., Pardubice*, (2006) 60.
3. A.Zakery, S.R. Elliott, *Optical properties and applications of chalcogenide glasses; a review, J. Non-Cryst. Sol.*, 330 (2003) 1-12.
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, *Влияние примесей галогенов на перенос носителей заряда в стеклообразной системе Se-As, ФТП*, **27** (1993) 959-965.
6. L.P.Kazakova, E.A.Lebedev, N.B.Zakharova, I.I.Yatlinko, A.I.Isayev, S.I.Mekhtiyeva, *Improvement of charge transport in Se-As glasses by doping with halogens, J. of Non–Cristalline solids*, **167** (1994) 65-69.
7. A.I.Isayev, S.I.Mekhtiyeva, A.K.Rzayev, *The effect of halogen impurities on electroconductivity of chalcogenide glass semiconductor Se-As system, Turkish J. of Physics*, **22** (1998) 263-266.
8. A.I.Isayev, S.I.Mekhtieva, N.Z.Jalilov, R.IAlekperov, *Localized states in the band gap of chalcogenide glass-like semiconductors of Se-As system with Sm impurity, Solid State Communications*, **149** iss 1-2 (2009) 45-48.
9. A.I.Isayev, S.I.Mekhtiyeva, N.Z.Jalilov, R.IAlekperov, V.Z.Zeynalov, *The optical absorption of Se₉₅As₅ system doped by atoms of samarium, J.of Optoelectronics and Advanced Materials-RC*, **1** ISS, 8 (2007) 368-372.
10. Я.Г.Клява, *Правило Урбаха и континуальная неупорядоченность в некристаллических твердых телах, ФТТ*, **27** (1985) 1350-1353.
11. А.И.Исаев, С.И.Мехтиева, С.Н.Гарибова, Р.И.Алекперов, В.З.Зейналов, Оптические константы халькогенидной стеклообразной полупроводниковой системы Se-As, содержащей примеси фторида европия (EuF_3), *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXX** №2 (2010) 121-126.

12. E.Voronkov, *Calculation of threshold voltage for phase-change memory device. J. Non.- Cryst. Solids.*, **353** (2007) 2591-2594.
13. Л.П.Казакова, К.Д.Цендин, *Изменение концентрации U-центров в халькогенидных стеклообразных полупроводниках системы Se-As при легировании металлами и галогенами, ФТП*, **33** (1999) 866-869.
14. М.Ламперт, П.Марк, *Инжекционные токи в твердых телах, М., Мир*, (1973) 416.
15. Н.Ф.Мотт, Э.А.Девис, *Электронные процессы в некристаллических веществах, М., Мир*, (1982) 664.

EuF₃ AŞQARLI Se₉₅As₅ HALKOGENİD ŞÜŞƏVARI YARIMKEÇİRİCİSİNDƏ İNJEKSİYA CƏRƏYANLARI

A.İ.İSAYEV, S.İ.MEHİDİYEVA, S.N.GƏRİBOVA, V.Z.ZEYNALOV, M.M.SEYİDOV

Müəyyən olunmuşdur ki, Al-Se₉₅As₅<EuF₃>-Te strukturunda elektrik yükünün daşınması iki qrup dayaz (E_t, E_{t1}) və dərin (E_{t2}) tələlərin iştirak etdiyi monopolyar injeksiya mexanizmi ilə həcmi yüklərlə məhdudlaşan cərəyanlarla baş verir. Tələlərin konsentrasiyası və aktivləşmə enerjisi təyin olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, EuF₃ aşqarları tələlərin, xüsusilə, Fermi səviyyəsi ətrafında yerləşən dərin tələlərin konsentrasiyasına ciddi təsir edir.

THE INJECTION CURRENTS OF Se₉₅As₅ GLASS-LIKE SEMICONDUCTOR, CONTAINING EuF₃ IMPURITY

A.I.ISAYEV, S.I.MEKHTIYEVA, S.N.GARIBOVA, V.Z.ZEYNALOV, M.M.SEYIDOV

It has been established that transfer of charge carries (holes) in Al-Se₉₅As₅<EuF₃>-Te structure has been carried out by monopolar injection current mechanism limited by space charged with two groups of capture traps-shallow (E_t, E_{t1}) and deep (E_{t2}). It has been defined concentration and energy location of these traps. It has been shown that EuF₃ impurity influence heavily on concentration of capture traps, especially they influence on deep traps has located about Fermi level.

Редактор:Дж.Абдинов

УДК: 537.622.4; 537.9; 54.057; 548.55

ФАЗОВЫЕ СООТНОШЕНИЯ И МАГНЕТОДИЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФАЗ В СИСТЕМАХ TiGaSe_2 - $\text{TiCrS}_2(\text{Se}_2)$

Р.Г.ВЕЛИЕВ, МИР-ГАСАН Ю.СЕЙДОВ, Э.М.КЕРИМОВА, Р.З.САДЫХОВ,
Ф.М.СЕЙДОВ, Ю.Г.АСАДОВ, Н.З.ГАСАНОВ

*Институт физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 33
ramizveliyev@gmail.com*

поступила: 30.05.2011
принята к печати: 12.09.2011

Ключевые слова: синтез кристаллов, слоистые соединения, сегнетоэлектрики, диэлектрические свойства, ферромагнетики, магнитные свойства.

РЕФЕРАТ

Исследование диэлектрических свойств слоистого соединения TiGaSe_2 выявило, что TiGaSe_2 является сегнетоэлектриком ($T_c=114\text{K}$) с промежуточной несоизмеримой фазой ($T_i=117,2\text{K}$). Магнитные исследования слоистых соединений TiCrS_2 и TiCrSe_2 обнаружили, что эти соединения являются ферромагнетиками с $T_c^p=115\text{K}$ и 120K , соответственно. В системах TiGaSe_2 - $\text{TiCrS}_2(\text{Se}_2)$ методом дифференциально-термографического анализа определены области гомогенного и гетерогенного сосуществования сегнетоэлектрического и ферромагнитного упорядочений.

ВВЕДЕНИЕ

Поиск сильноанизотропных (слоистых, цепочечных) сегнетомагнетно-активных соединений и сплавов является актуальной задачей физики твердого тела, так как сильная анизотропия химической связи между атомными комплексами в низкосимметричной кристаллической структуре таких соединений, в некоторых случаях (структура содержит плоскостные или цепочечные построения), предопределяет специфические особенности, благодаря которым эти кристаллы становятся объектами для модельных представлений.

Исторически сложилось так, что полный существующий набор механизмов электрического упорядочения (сегнетоэлектрики, антисегнетоэлектрики, несобственные сегнетоэлектрики, собственные и несобственные сегнетоэлектрики с промежуточной несоизмеримой фазой, сегнетизлектрики) был спрогнозирован, а затем реализован в конкретных кристаллах, на основе аналогии явления с механизмами магнитного упорядочения в магнетиках.

Такие материалы проявляют магнетоэлектрический эффект, который отличается появлением электрической поляризации при приложении магнитного поля и появлением намагниченности, когда к материалу прилагается электрическое поле [1]. Изучение сосуществования электрического и магнитного упорядочений в сплавах как гомогенных, так и гетерогенных (композиты) приобрело еще большую актуальность в связи с развитием технических возможностей нанотехнологии [2].

В связи с вышеизложенным были исследованы диэлектрические свойства слоистого соединения TiGaSe_2 и магнитные свойства слоистых соединений TiCrS_2 , TiCrSe_2 . Дифференциально-термографическим анализом (ДТА) были охарактеризованы фазовые соотношения в системах TiGaSe_2 - TiCrS_2 и TiGaSe_2 - TiCrSe_2 .

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Составы TiGaSe_2 , TiCrS_2 и TiCrSe_2 , взвешенные в стехиометрическом соотношении из химических элементов, синтезировались при температуре $\sim 1150\text{K}$

в кварцевых ампулах, эвакуированных до остаточного давления $\sim 10^{-3}$ Па. Предварительно хром приводили шаровой мельницей в порошкообразное состояние.

Синтез проводился методом наклонной печи в течение 120 часов. Угол наклона печи составлял приблизительно 30 градусов. Продукт реакции тщательно измельчался и синтез повторялся. Затем полученные сплавы приводились в порошкообразное состояние, спрессовывались и в эвакуированных кварцевых ампулах подвергались гомогенизирующему отжигу при температуре $\sim 600\text{K}$ в течение 480 часов.

Рентгенографический анализ образцов TlGaSe_2 , TlCrS_2 и TlCrSe_2 , специально подготовленных после отжига, был проведен при комнатной температуре ($\sim 300\text{K}$) на дифрактометре ДРОН-3М (CuK_α -излучение, Ni-фильтр, $\lambda=0,15418\text{nm}$, режим: 35кВ, 10мА). Угловое разрешение непрерывного сканирования составляло $\sim 0,01^\circ$. Углы дифракции были определены по максимуму интенсивности дифракционных отражений. В экспериментах ошибка определения углов отражений не превышала $\Delta\theta = \pm 0,02^\circ$. В интервале углов $10^\circ \leq 2\theta \leq 70^\circ$ были зафиксированы дифракционные отражения от образцов TlGaSe_2 , TlCrS_2 и TlCrSe_2 , которые индицируются на основе сингоний с параметрами кристаллической решетки (Таблица 1 и 2): моноклинной ($a=1,0771\text{nm}$, $b=1,0769\text{nm}$, $c=1,5638\text{nm}$, $\beta=100,4^\circ$, $z=16$, $\rho_x=6425\text{кг/м}^3$), гексагональной ($a=0,3538\text{nm}$, $c=2,1962\text{nm}$, $c/a \approx 6,207$, $z=3$, $\rho_x=6705\text{кг/м}^3$) и гексагональной ($a=0,3707\text{nm}$, $c=2,2688\text{nm}$, $c/a \approx 6,120$, $z=3$, $\rho_x=6186\text{кг/м}^3$), соответственно.

Таблица 1.

Рентгенографические данные для TlGaSe_2 .

№ п/п	I/I_0	$d_{\text{эксп.}} (\text{нм})$	$d_{\text{расч.}} (\text{нм})$	hkl
1	20	0,44102	0,44102	122
2	5	0,40277	0,40272	202
3	100	0,38430	0,38421	004
4	20	0,35575	0,35598	221
5	5	0,34005	0,34002	130
6	5	0,32514	0,32560	114
7	20	0,32054	0,32252	222
8	70	0,28992	0,28940	312
9	10	0,26749	0,26695	025
10	60	0,25947	0,25947	034
11	5	0,24001	0,24001	240
12	5	0,21190	0,21110	150
13	5	0,20271	0,20377	117
14	20	0,19311	0,19270	153
15	20	0,19143	0,19204	512
16	5	0,18241	0,18221	154
17	20	0,17096	0,17079	208
18	10	0,16199	0,16204	119

Следует отметить, что наши рентгеновские данные для образца TlGaSe_2 хорошо согласуются с кристаллоструктурными исследованиями, выполненными в работе [3]. Элементарная ячейка кристалла TlGaSe_2 содержит двумерно периодический слой групп полиэдров $\text{Ga}_4\text{Se}_{10}$ [3], каждый из которых представляет собой объединение четырех элементарных тетраэдров GaSe_4 , размещенных по алмазному закону вокруг центрального пустого октаэдра Se_6 . Между полиэдрическими комплексами $\text{Ga}_4\text{Se}_{10}$ из разных слоев доминирует слабая Ван-дер-Ваальсовская связь, а химическая связь внутри слоя имеет ионно-ковалентный

характер. Поэтому во время расслаивания кристалла TlGaSe_2 полиэдры $\text{Ga}_4\text{Se}_{10}$ сохраняются, т.е. элементарная ячейка кристалла TlGaSe_2 имеет двухслойно-плоскостное построение из групп полиэдров $\text{Ga}_4\text{Se}_{10}$, и в пространственном кристаллоструктурном строении слоистого соединения TlGaSe_2 , вследствие сильной анизотропии химической связи между атомными комплексами, возможны как сверхструктурные, так и политипные превращения.

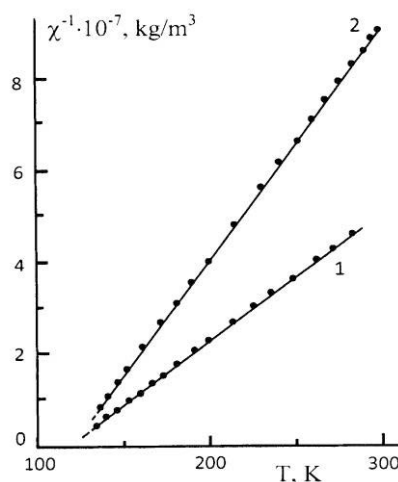
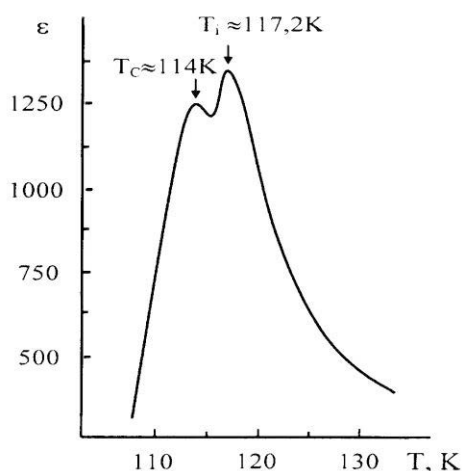
Таблица 2.

Рентгенографические данные для TlCrS_2 , TlCrSe_2 .

TlCrS_2				№ п/п	TlCrSe_2			
I/I_0	$d_{\text{эксп.}}$ (нм)	$d_{\text{расч.}}$ (нм)	hkl		I/I_0	$d_{\text{эксп.}}$ (нм)	$d_{\text{расч.}}$ (нм)	hkl
50	0,7314	0,7307	0003	1	50	0,7565	0,7563	0003
20	0,4388	0,4384	0005	2	10	0,4537	0,4538	0005
100	0,3662	0,3653	0006	3	80	0,3781	0,3782	0006
70	0,3065	0,3064	$\bar{1}0\bar{1}0$	4	40	0,3242	0,3241	0007
10	0,3034	0,3035	$\bar{1}0\bar{1}4$	5	15	0,2950	0,2950	$\bar{1}0\bar{1}3$
40	0,2688	0,2675	$\bar{1}0\bar{1}5$	6	10	0,2837	0,2836	0008
40	0,2513	0,2512	0009	7	20	0,2791	0,2790	$\bar{1}0\bar{1}4$
30	0,2443	0,2436	00010	8	50	0,2629	0,2617	$\bar{1}0\bar{1}5$
20	0,2201	0,2192	$\bar{1}0\bar{1}8$	9	100	0,2522	0,2521	0009
10	0,2043	0,2043	$\bar{1}0\bar{1}9$	10	20	0,1890	0,1891	00012
20	0,1913	0,1907	00012	11	50	0,1852	0,1851	00015
25	0,1440	0,1446	$\bar{2}0\bar{2}5$	12	20	0,1512	0,1513	$\bar{2}0\bar{2}5$

Для исследования температурной зависимости диэлектрической проницаемости $\varepsilon(T)$ слоистого соединения TlGaSe_2 были использованы образцы в форме пластин полярного среза, вырезанные из монокристаллического слитка, который был выращен методом Бриджмена-Стокбаргера. При этом скорость передвижения фронта кристаллизации составляла 2мм/час. Измерения действительной части диэлектрической проницаемости TlGaSe_2 были выполнены с помощью моста переменного тока на частоте 5кГц. Предварительно пластины TlGaSe_2 осторожно полировались, очищались и покрывались серебряной пастой. Размеры электродов были около 5×5мм, межэлектродное расстояние – 1мм.

Для исследования температурной зависимости обратной парамагнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ слоистых соединений TlCrS_2 и TlCrSe_2 были приготовлены



цилиндрической формы с размерами $h \approx 3 \text{ мм}$, $d \approx 2,5 \text{ мм}$. Измерения осуществлялись с помощью метода Фарадея на магнетоэлектрических весах.

Рис.1.

Температурная зависимость диэлектрической проницаемости TiGaSe_2 .

Рис.2.

Температурные зависимости обратной парамагнитной восприимчивости $\text{TiCrS}_2(1)$, $\text{TiCrSe}_2(2)$.

Как диэлектрические, так и магнитные исследования проводились в температурном интервале $77 \div 300 \text{ К}$ в квазистатическом режиме, при этом скорость изменения температуры составляла $0,2 \text{ К/мин}$. В процессе измерений образцы находились внутри азотного криостата, где в качестве датчика температуры применялась дифференциальная медь-константановая термопара, спай которой стационарно закреплялся на кристаллодержателе вблизи образца, а опорный спай находился при температуре тающего льда.

Методом ДТА охарактеризовывались фазовые соотношения в системах $\text{TiGaSe}_2\text{-TiCrS}_2$ и $\text{TiGaSe}_2\text{-TiCrSe}_2$. Исследования были проведены на низкочастотном термографическом регистраторе (НТР-64), позволяющем фиксировать температуру фазовых превращений с точностью $\pm 5 \text{ К}$. Скорость нагревания составляла $2 \div 4 \text{ К/мин}$. Температуру контролировали Pt-Pt/Rh термопарой, проградуированной по реперным веществам в интервале $430 \div 1560 \text{ К}$.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На Рис.1 приведена зависимость $\varepsilon(T)$ слоистого соединения TlGaSe_2 , измеренная при атмосферном давлении. Как видно из рисунка, кривая $\varepsilon(T)$ TlGaSe_2 характеризуется аномалиями в виде максимумов, связанных с точками фазовых переходов в несоразмерную фазу при $T_1=117,2\text{K}$ и соразмерную сегнетоэлектрическую фазу при $T_c=114\text{K}$. Наличие несоразмерной фазы на кривой $\varepsilon(T)$ показывает, что в этом соединении наряду со сверхструктурными имеют место, по-видимому, и политипные превращения. Зависимость $\varepsilon(T)$ для TlGaSe_2 в параэлектрической и сегнетоэлектрической фазах хорошо аппроксимируется законом Кюри-Вейсса с величиной константы Кюри приблизительно 10^3K . Отметим, что температурное положение аномалий на кривой $\varepsilon(T)$ и величина константы Кюри TlGaSe_2 хорошо согласуются с результатами, полученными другими авторами [4-8].

На Рис.2 представлена температурная зависимость обратной парамагнитной восприимчивости $\chi^{-1}(T)$ слоистых соединений TlCrS_2 и TlCrSe_2 . Как видно из рисунка, эта зависимость характерна для ферромагнитных материалов. Парамагнитная температура Кюри T_C^p , определенная экстраполяцией зависимости $\chi^{-1}(T)$ на ось температур, равна 115K для TlCrS_2 и 120K для TlCrSe_2 .

Из зависимости $\chi^{-1}(T)$ рассчитан экспериментальный эффективный магнитный момент μ_{eff} , который оказался равным $3,26\mu_B$ для TlCrS_2 и $3,05\mu_B$ для TlCrSe_2 . Теоретическое значение, рассчитанное с учетом чисто спинового значения магнитного момента иона хрома (Cr^{3+}), равно $3,85\mu_B$. Достаточно большое отклонение μ_{eff} TlCrS_2 и TlCrSe_2 от теоретического значения указывает на наличие квазидвумерного магнитного упорядочения в парамагнитной области слоистых ферромагнетиков TlCrS_2 , TlCrSe_2 . Низкоразмерность магнитной структуры этих ферромагнетиков отмечается также в работах [9,10].

Для решения поставленной в начале статьи физической задачи необходимо определить области гомогенного и гетерогенного сосуществования сегнетоэлектрика TlGaSe_2 с ферромагнетиками TlCrS_2 и TlCrSe_2 .

Построенная по результатам ДТА диаграмма состояния системы TlGaSe_2 - TlCrS_2 представлена на Рис.3. Эта система является квазибинарной эвтектического типа с твердыми растворами на основе TlGaSe_2 (гомогенная область сосуществования сегнетоэлектрического и ферромагнитного упорядочений), доходящими при температуре 300K до $8\text{мол}\%$ TlCrS_2 . При соотношении компонентов $1:1$ образуется эвтектика. Эвтектика плавится при температуре 975K и имеет состав $(\text{TlGaSe}_2)_{0,5}(\text{TlCrS}_2)_{0,5}$, т.е. в этом эвтектическом сплаве гетерогенно (композиционно) сосуществуют сегнетоэлектрическое и ферромагнитное упорядочения.

Рис.3.

Диаграмма состояния системы TlGaSe_2 - TlCrSe_2 .

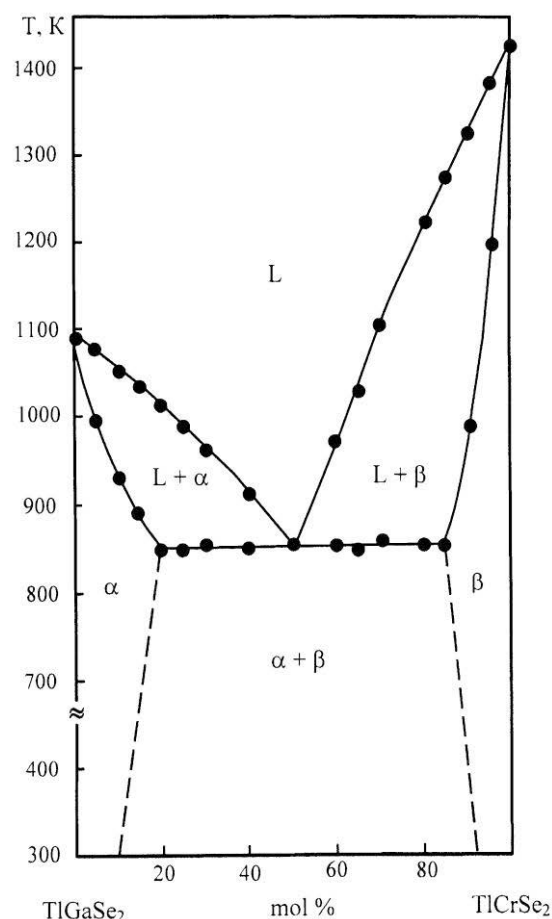
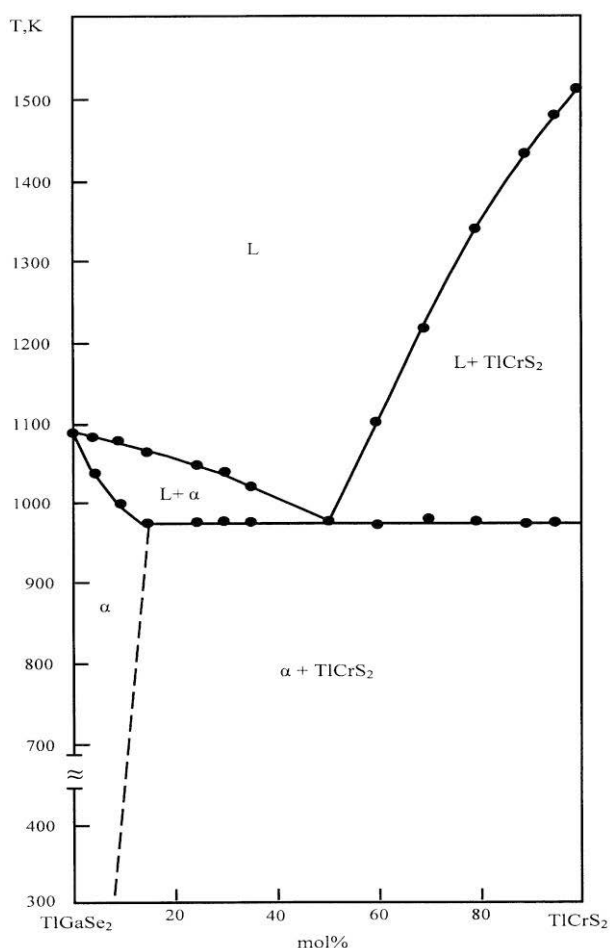
Рис.4.

Диаграмма состояния системы TlGaSe_2 - TlCrSe_2 .

Диаграмма состояния системы TlGaSe_2 - TlCrSe_2 , также построенная по результатам ДТА, представлена на Рис.4. Эта система является квазибинарной эвтектического типа с ограниченными областями твердых растворов на основе TlGaSe_2 , достигающими до 10мол% TlCrSe_2 , и на основе TlCrSe_2 , до 8мол% TlGaSe_2 (гомогенные области сосуществования сегнетоэлектрического и ферромагнитного упорядочений) при 300К. При соотношении компонентов 1:1 образуется эвтектика, которая плавится при температуре 850К и имеет состав $(\text{TlGaSe}_2)_{0,5}(\text{TlCrSe}_2)_{0,5}$, т.е. в этом эвтектическом сплаве гетерогенно (композиционно) сосуществуют сегнетоэлектрическое и ферромагнитное упорядочения.

Отметим, что эвтектические сплавы в системах TlGaSe_2 - TlCrS_2 и TlGaSe_2 - TlCrSe_2 могут быть базовыми материалами для синергетики.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ



Температурная зависимость диэлектрической проницаемости слоистого соединения TlGaSe_2 имеет две аномалии, которые связаны с фазовыми переходами в несоизмеримую фазу при температуре $T_i=117,2\text{K}$ и соразмерную сегнетоэлект-рическую фазу при $T_c=114\text{K}$. В параэлектрической и сегнетоэлектрической фазах $\varepsilon(T)$ TlGaSe_2 следует закону Кюри-Вейсса с

постоянной Кюри порядка 10^3K . Температурная зависимость обратной парамагнитной восприимчивости слоистых соединений TiCrS_2 и TiCrSe_2 имеет вид, характерный для ферромагнитных соединений, при этом T_C^P для них равна 115K и 120K, соответственно. Достаточно большое отклонение μ_{eff} TiCrS_2 и TiCrSe_2 от теоретического значения указывает на наличие квазидвумерного магнитного упорядочения в парамагнитной области этих слоистых ферромагнетиков.

Методом ДТА определены области гомогенного и гетерогенного сосуществования сегнетоэлектрического и ферромагнитного упорядочений в системах TiGaSe_2 - TiCrS_2 и TiGaSe_2 - TiCrSe_2 . Эвтектические сплавы в этих системах могут быть базовыми материалами для синергетики.

1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Москва, «Наука», (1982) 620.
2. N.Mamedov, K.Wakita, S.Akita, Y.Nakayama, *1D-TlInS₂: Band Structure, Dielectric Function and Nanorods*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **44** (2005) 709-714.
3. D.Müller, H.Hahn, *Zur Struktur des TiGaSe₂*, *Z. Anorg. Allg. Chem.*, **438** (1978) 258-272.
4. А.К.Абиев, Н.А.Бахышов, А.Э.Бахышов, М.С.Гаджиев, *Поведение петель диэлектрического гистерезиса в области фазовых переходов в TiGaSe₂*, *Изв. Вузов. Физика*, **12** (1989) 84-86.
5. H.Hochheimer, E.Gmelin, W.Bauhofer, *Study of the Ferroelectric Phase Transition of TiGaSe₂ by Dielectric, Calorimetric, Infrared and X-ray Diffraction Measurements*, *J. Phys. B: Condens. Matter*, **73** (1988) 257-263.
6. D.F.Mc.Moorrow, R.A.Cowley, P.D.Hatton, J.Banys, *The Structure of the Paraelectric and Incommensurate Phases of TiGaSe₂*, *J. Phys.: Condens. Matter*, **2** (1990) 3699-3712.
7. R.M.Sardarly, O.A.Samedov, I.Sh.Sadykhov, *Ferroelectricity and Polytypism in TiGaSe₂ Crystals*, *Solid State Commun.*, **77** (1991) 453-455.
8. К.Р.Аллахвердиев, Н.Д.Ахмед-заде, Т.Г.Мамедов, Т.С.Мамедов, М.Ю.Сейдов, *Особенности поведения слоистых кристаллов TlInS₂ и TiGaSe₂ вблизи фазовых переходов в постоянном электрическом поле*, *Физ. низк. темпер.*, **26** (2000) 76-83.
9. М.А.Алджанов, А.А.Абдуррагимов, С.Г.Султанова, М.Д.Наджафзаде, *Низкотемпературная теплоемкость TiCrS₂*, *ФТТ*, **49** (2007) 309-310.
10. M.Aljanov, M.Nadjafzade, Z.Seidov, M.Gasumov, *Heat Capacity and Magnetic Susceptibility of TiCrSe₂*, *Tr. J. of Physics*, **20** (1996) 1071-1073.

TiGaSe_2 - $\text{TiCrS}_2(\text{Se}_2)$ SİSTEMLƏRİNDƏ FAZA NİSBƏTLƏRİ VƏ FAZALARIN MAQNETOĐİELEKTRİK XASSƏLƏRİ

**R.G.VƏLİYEV, MİR-HƏSƏN YU.SEYİDOV, E.M.KƏRİMOVA, R.Z.SADIXOV, F.M.SEYİDOV,
YU.G.ƏSƏDOV, N.Z.HƏSƏNOV**

TiGaSe_2 laylı birləşməsinin dielektrik xassələrinin tədqiqi göstərmişdir ki, bu birləşmə aralıq qeyri-ölçülü ($T_i=117,2\text{K}$) fazası olan seqnetoelektrikdir ($T_c=114\text{K}$). TiCrS_2 və TiCrSe_2 laylı birləşmələrinin maqnit tədqiqatları nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, bu birləşmələr uyğun olaraq $T_C^P=115\text{K}$ və 120K olan ferromaqnetiklərdir. TiGaSe_2 - $\text{TiCrS}_2(\text{Se}_2)$ sistemlərində DTA metodu ilə seqnetoelektrik və ferromaqnit homogen və heterogen nizamlılığının mövcud olması oblastı təyin edilmişdir.

PHASE RELATIONS AND THE MAGNETO-DIELECTRIC PROPERTIES OF PHASES IN THE SYSTEMS OF TiGaSe_2 - $\text{TiCrS}_2(\text{Se}_2)$

**R.G.VELIYEV, MIR-GASAN YU.SEYIDOV, E.M.KERIMOVA, R.Z.SADYKHOV,
F.M.SEYIDOV, YU.G.ASADOV, N.Z.GASANOV**

The investigation of dielectric properties of layered compound TlGaSe_2 revealed that it has been ferroelectric ($T_c=114\text{K}$) with intermediate incommensurate phase ($T_i=117,2\text{K}$). The magnetic investigation of layered compounds TlCrS_2 and TlCrSe_2 has been discovered that these compounds have been ferromagnets with $T_C^p=115\text{K}$ and 120K , respectively. By method of DTA the areas of homogenous and heterogeneous coexistence of ferroelectric and ferromagnetic orderings have been determined in the systems of TlGaSe_2 – $\text{TlCrS}_2(\text{Se}_2)$.

Редактор: Г.Султанов

УДК 538.945

РАЗМЫТИЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В СИСТЕМЕ Cd-Ba-Cu-O

В.М.АЛИЕВ

*Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр.Г.Джавида, 33
v_aliev@bk.ru*

поступила: 12.04.2011 принята к печати: 13.06.2011	РЕФЕРАТ Исследованы электрические свойства систем Cd-Ba-Cu-O. Показано, что сверхпроводящий переход(СП) в них происходит при 86K; фазовые переходы (ФП) имеют размытый характер. Определены параметры размытия ФП: T_0 , a , $L_0(T)$ и dL_0/dT . Установлено, что в иттриевых ВТСП полное замещение Y на Cd приводит к расширению области ФП и уменьшению максимального значения скорости ФП (dL_0/dT). Установлено, что в иттриевых керамиках замена Y на Cd приводит к смене типа проводимости от дырочного к электронный.
---	---

Ключевые слова: сверхпроводимость, фазовые переходы, степень размытия, скорость фазовых превращений

ВВЕДЕНИЕ

Исследование фазовых переходов (ФП) является одним из актуальных направлений физики твердого тела. Одним из важных вопросов является классификация исследуемого ФП: в какой мере он размыт и что влияет на степень размытия. Для решения этих проблем необходимо определение параметров ФП, позволяющее судить о степени его размытия. Анализ температурных зависимостей электрических свойств ВТСП вблизи и в области ФП показывает, что ФП в них носит размытый характер, обусловленные особенностями сверхпроводников второго рода. Исследование размытия вблизи и в области ФП позволяет выявить механизмы, приводящие к размытию, и судить о качестве исследуемого объекта. Особенно, это относится к новым, видоизмененным материалам ВТСП. Первые исследования размытия ФП в ВТСП выполнены для иттриевых керамик [1,2]. Результаты интерпретированы в рамках теории размытых ФП [3]. Поэтому данная работа посвящена определению параметров размытия ФП в системе Cd-Ba-Cu-O, полученной полной заменой атомов Y на Cd.

ЭКСПЕРИМЕНТ

Известно, что Y-Ba-Cu-O, несмотря на максимальное число возможных изоморфных замещений, не входит в число систем, где изоморфное гетеровалентное замещение приводит к увеличению температуры перехода T_c . Несмотря на это исследование замещения в классической структуре $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ остается актуальной проблемой, поскольку оно позволяет сделать определенные выводы о механизме сверхпроводимости и вкладе в сверхпроводимость Y, Ba, Cu-слоев.

Отметим, что иттрий и кадмий гетеровалентны и близки по ионному радиусу [4] (соответственно 0,093 и 0,099нм), что дало основание для проведения исследований по замещению в Y-Ba-Cu-O иттрия на кадмий.

Новый керамический сверхпроводящий $CdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ получен следующим образом: исходные компоненты (Y_2O_3 , CdO, $BaCO_3$ и CuO) составов $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ и $CdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ в стехиометрическом соотношении перемешивались, прессовались и

отжигались в платиновом тигле в воздушной среде при 1193К в течение 22 часов. По завершении нагрева полученный материал заново перетирался, прессовался, и выдерживался при этой температуре ещё пять часов. Затем температура повышалась до 1273К, и материал выдерживался при этой температуре в течение одного часа. Далее температура понижалась до прежнего уровня, после двухчасовой выдержки материал медленно охлаждался до комнатной температуры. Электрические измерения проводились четырехзондовым методом на постоянном токе. Измерительный ток составляло 2мА. Регистрация температуры проводилась с помощью медь-константановых термопар. Регистрация сигналов с термопар производилась с помощью компаратора напряжений, что делало возможным практически полностью скомпенсировать паразитные э.д.с. до начала измерений. Температурный шаг измерений зависимости $\rho(T)$ составлял $\sim 0,5 \div 1$ К. Измерение термоэдс (S) проведено при перепаде температур $\Delta T = 2 \div 3$ К.

Получение нового сверхпроводящего $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ ВТСП материала подтверждено рентгенофазным анализом [5, 6]. Установлено, что при замене Y на Cd в составе $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ материал сохраняет свои сверхпроводящие свойства. В сверхпроводящем $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ материале кристаллическая структура остается неизменной, т.е. идентифицируется в орторомбической ячейке с параметрами $a=3,82\text{\AA}$, $b=3,88\text{\AA}$ и $c=11,68\text{\AA}$.

На Рис.1 представлены температурные зависимости удельного сопротивления $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ в сопоставлении с $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$. Видно, что в иттриевой керамике $\rho(T)$, начиная с 97К, удельное сопротивление уменьшается, при 93К скачком падает и при 90К завершается СП ФП. В кадмиевой керамике в нормальной фазе значение удельного сопротивления в 3,5 раза меньше, но уменьшение ρ начинается с 94К и завершается при 86К.

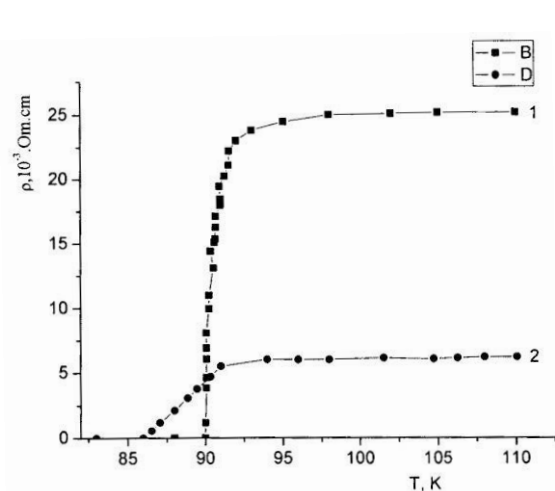


Рис.1.

Температурные зависимости удельного сопротивления образцов: 1- $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, 2- $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.

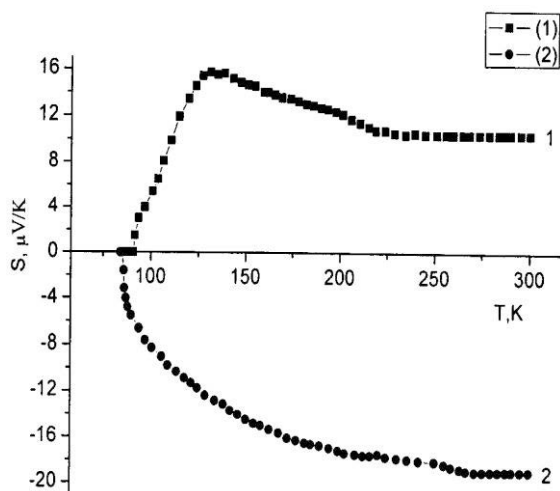


Рис.2.

Температурные зависимости термоэдс.: 1- $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, 2- $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.

Из температурных зависимостей термоэдс $S(T)$ в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ и $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, представленных на Рис.2, видно, что для $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ керамик СП ФП наблюдается при 90К, а для $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ — при 86К. С замещением Y на Cd в системе Y-Ba-Cu-O происходит смена знака проводимости с положительного на отрицательный, значение S в нормальной области в двое больше, чем с Y. С понижением температуры, термоэдс. $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ уменьшается, а термоэдс. $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ слегка возрастает. При переходе обоих образцов в СП состояние S резко падает до

нуля. Известно, что в составе ВТСП образцов ионы меди находятся в состоянии Cu^{1+} , Cu^{2+} , Cu^{3+} [7] и установлено, что для возникновения сверхпроводимости необходимая средняя валентность меди должна быть больше (дырочная сверхпроводники) или меньше +2 (электронные сверхпроводники). Это является основной причиной электронной проводимости образца $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Представленные данные о $\rho(T)$ и $S(T)$ указывают на размытый характер сверхпроводимости в области ФП. В работах [8, 9] исследованы вопросы размытия ФП в ВТСП. Показано, что определение параметров ФП способствует выявлению закона перехода нормальной фазы в СП фазу, степень и область его размытия, влияние на него магнитного поля и различного рода дефектов в керамических образцах. Это становится возможным, если по экспериментальным данным определить точную температуру ФП (T_0), температурную постоянную ФП (a), функцию распределения фаз ($L_0(T)$) и температурную скорость ФП (dL_0/dT). Методика определения этих параметров основана на феноменологической теории РФП [3] и подробно описана и апробирована в работах [1,2,8-10]. Однако здесь следует напомнить об основных положениях теории и методики. Теория размытых ФП в конденсированных системах основана на введении функции включения $L(T)$. Предполагается, что если термодинамические потенциалы α и β -фаз обозначить через Φ_α и Φ_β , то общий термодинамический потенциал в области сосуществования фаз $\Phi(T)$ может быть представлен в виде:

$$\Phi(T) = \Phi_\alpha(T) - \Delta\Phi(T) \cdot L(T), \quad (1)$$

где его изменение $\Delta\Phi(T) = \Phi_\alpha(T) - \Phi_\beta(T)$.

Когда ФП происходит в интервале $\Delta T = T_2 - T_1$ ($T_2 > T_1$), функция включения L должна удовлетворять условиям

$$L(T) = \begin{cases} 0 & T < T_1 \\ 0 < L < 1 & T_1 < T < T_2 \\ 1 & T > T_2 \end{cases} \quad (2)$$

Согласно теории РФП, для $L(T)$ в нулевом приближении получено, что

$$L_0(T) = \frac{1}{1 + \exp[a_0(T - T_0)]} \quad (3)$$

Учитывая, что $L_0(T)$ характеризует относительную долю фаз в области их сосуществования, ее можно представить в простом виде

$$L_0(T) = \frac{m_\beta(T)}{m_\alpha(T) + m_\beta(T)} = \left[1 + \frac{m_\alpha(T)}{m_\beta(T)} \right]^{-1}, \quad (4)$$

где m_α и m_β - массы α и β - фаз.

Из совместного решения (3) и (4) получено, что

$$a = (T_0 - T)^{-1} \cdot \ln m_\alpha / m_\beta. \quad (5)$$

Поскольку a постоянная величина, то множитель $\ln(m_\alpha / m_\beta = y)$ в (5) должен быть линейной функцией температуры. Поэтому из температурной зависимости $\ln y$ определяется температура ФП T_0 . Наиболее информативной является производная $L_0(T)$ по температуре, выражающая температурную скорость фазовых превращений каждой фазы

$$\frac{\partial L}{\partial T} = -\frac{a}{2} \cdot \frac{1}{1 + \exp[a_0(T - T_0)]} \quad (6)$$

В случае сверхпроводников, если за одну фазу принять нормальную фазу (н.ф.), а за другую - сверхпроводящую (с.п.ф.), то предложенный метод можно применить и для ВТСП. Тогда соответствующие массы примут значение $m_{н.ф.}$ и $m_{с.п.ф.}$ и их следует определять по изменениям физических характеристик в области СП ФП. В данном случае они определены из данных $\rho(T)$ и $S(T)$. Из температурной зависимости $\ln \nu$ найдена температура ФП (T_0) (точка пересечения прямых с осью абсцисс), а из наклона $\Delta \ln \nu / \Delta T$ (тангенс угла) температурная постоянная a (Рис.3).

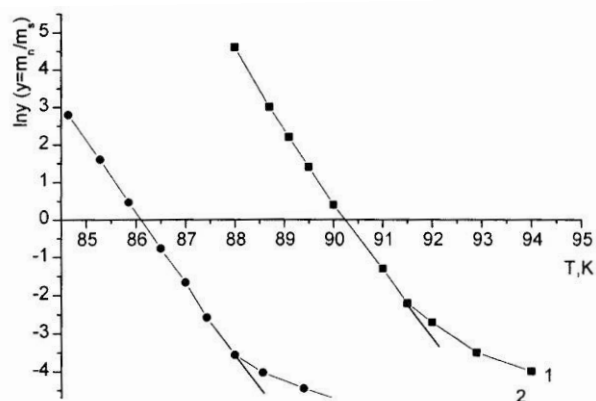


Рис.3.

Температурные зависимости $\ln \nu(T)$ для образцов: 1- $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, 2- $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.

Из этого рисунка видно, что в отрицательной области $\ln \nu$ имеет место заметное отступление от прямой, которое связано с асимметрией низкотемпературной части кривой $\rho(T)$ в области ФП. Такая зависимость $\rho(T)$ проявляется при сильном размытии ФП, вызванном высокой концентрацией дефектов. Эти параметры позволили по формуле (3) вычислить температурную зависимость $L_0(T)$, а по (6) dL_0/dT . Результаты вычислений приведены на Рис. 4 и на Рис. 5, из которых видно, что в иттриевых керамиках при полном замещении Y на Cd степень размытия ФП $dL_0/dT = a/4 = 0,3$ и область размытия $2T^* = 4\text{K}$ почти в двое возрастает, поскольку в $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_x$ они равны $dL_0/dT = 0,6$ и $2\Delta T^* = 2\text{K}$.

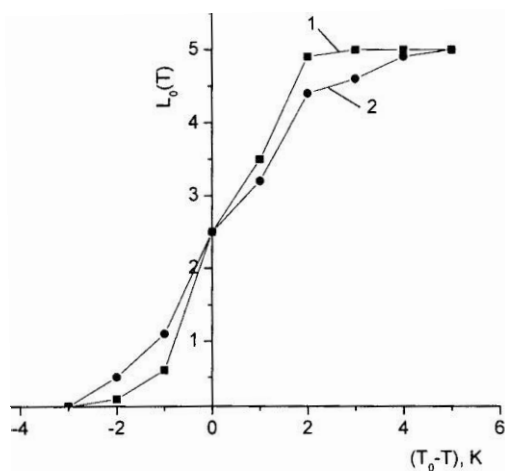


Рис.4.

Температурные зависимости функции включения $L(T)$ для образцов: 1- $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, 2- $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.

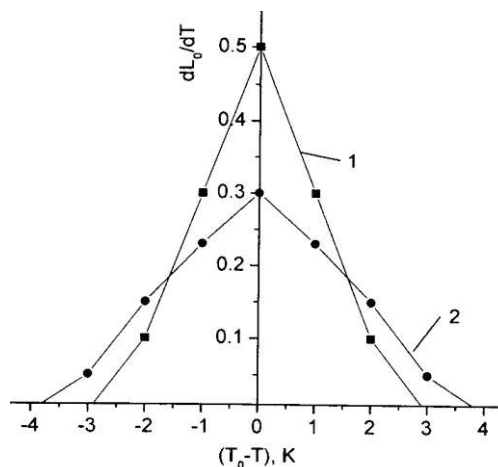


Рис.5.

Температурные зависимости производной функции включения dL/dT для образцов: 1- $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, 2- $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$.

Несмотря на это при полном замещении Y на Cd в системе $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ происходит изменение в кристаллической структуре. Это приводит к резкому понижению удельного сопротивления $\text{CdBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ по сравнению с $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (Рис.1).

1. С.А.Алиев, С.С.Рагимов, В.М.Алиев, О размытии фазового перехода в $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_x$, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of*

- Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXI** №2,5 (2001) 67-71.
2. S.A.Aliev, S.S.Ragimov, VM.Aliev, The diffuse phase transition in HTSC and the magnetic field influence on it, *J.Fizika*, **9** №3-4 (2003) 30-34.
 3. Б.Н.Ролов, Размытые фазовые переходы, Рига, (1972) 311.
 4. Ə.В.Əliyev, Y.Н.Нəсənov, S.İ.Sadıgzadə, *Ümumi və geyri-üzvi kimya, "Maarif", Baki*, (1987) 586.
 5. В.М.Алиев, С.С.Рагимов, Р.И.Селим-заде, М.И.Абдуллаев, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXVII** №5 (2007) 33-35.
 6. В.М.Алиев, С.А.Алиев, С.С.Рагимов, Г.Дж.Султанов, Б.А.Таиров, *Получение сверхпроводящей керамики $CdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ и исследование ее электрофизических свойств, ФНТ*, **37** (2011) 351-355.
 7. В.В. Немошкаленко, В.Х. Касияненко, Л.И. Николаев, П.В.Гель, С.К. Топлыго, А.Е.Морозовский, Валентность ионов меди, бария и празеодима в высокотемпературных сверхпроводящих соединениях системы $Y_{1-x}Pr_xBa_2Cu_3O_{7-\delta}$, *СФХТ*, **3** (1990), 1051-1057.
 8. В.М.Алиев, Размытие фазовых переходов в системе Bi-Sr-Zn-Cu-O *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXX** №2 (2010) 59-63
 9. S.A.Aliev, *The phase transition in bismuth HTSC, J. Fizika*, №4 (2002) 32-35.
 10. С.А.Алиев, *Размытие фазовых переходов в полупроводниках и высокотемпературных сверхпроводниках, Изд. Элм, Баку*, (2007) 286.

Cd-Ba-Cu-O SİSTEMİNDƏ FAZA KEÇİDLƏRİNİN YAYILMASI

V.M.ƏLİYEV

Cd-Ba-Cu-O sisteminin elektrik xassələri tədqiq olunmuşdur. Göstərilmişdir ki, bu sistemlərdə faza keçidi yayılmış şəkildə baş verir. $CdBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ ifratkeçirici keramik materialın yayılmış faza keçidinin parametrləri: T_0 , a , $L_0(T)$ və dL_0/dT təyin olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, ittriya ifratkeçirici sistemində onun Cd elementi ilə əvəz olunması faza keçidi oblastinin genişlənməsinə səbəb olur. Bu əvəzləmə faza keçidinin sürətinin (dL_0/dT) maksimum qiymətini azaldır. Eksperimentlə təsdiq edilmişdir ki, bu əvəzləmə Cd-Ba-Cu-O sistemində keçiriciliyin işarəsinin müsbətdən mənfiyə dəyişməsinə səbəb olur.

THE DIFFUSION OF THE PHASE TRANSITION IN THE Cd-Ba-Cu-O SYSTEM

V.M.ALIEV

The electrical properties of the Cd-Ba-Cu-O system have been investigated. It has been shown the superconducting phase transition (PT) in this system took place at $T=86K$; the phase transitions had the diffusion character. The parameters of diffusion T_0 , a , $L_0(T)$ and dL_0/dT have been obtained. It has been established the full substitute Y by Cd in the Y-based high temperature superconductors has led to increase of PT region and to decrease of maximal value of PT speed (dL_0/dT). It has been established in the Y-based ceramics substitute Y by Cd has led to the change of conduction type from hole on electron.

Редактор: Ю.Асадов

Pacs 543.424.429.2

DYNAMIC LIGHT SCATTERING AND ELECTRON MAGNETIC RESONANCE OF MAGNETIC LIQUIDS BASED ON NANOSIZED IRON OXIDE PARTICLES IN POLYETHYLENE GLYCOL/WATER SOLUTION

E.A.MASIMOV, E.G.ISMAILOV, C.R.FARADZHEV

*The Baku State University
AZ 1143, Baku, Z.Halilov st., 23
Institute of petrochemical processes NAS of Azerbaijan
AZ 1025, Baku, Hodjali ave., 30
spektr.masimov@rambler.ru*

received: 18.06.2011

accepted: 12.09.2011

ABSTRACT

Dynamic Light Scattering and Electron Magnetic Resonance Spectroscopy techniques were used to characterize the nano-sized clusters of iron oxides in aqueous and water-polyethylene-glycol dispersions. It was shown the formation of PEGylated nanoparticles of iron oxides.

Key words: dynamic light scattering, nanosized iron oxide, electron magnetic resonance

INTRODUCTION

Structural studies of ultra-dispersions of magnetic materials in liquids (ML) are extremely important for understanding of mechanisms of stabilization of the given systems and their effective utilization in various industrial and biomedical applications. ML takes an appreciable place among researches in nanobiotechnology for development of approaches to high-precision management of processes in live systems at subcellular level [1-3]. Considerable progress was outlined to use of ML in biomedicine, first of all for cancer treatment. However, there is a number of the problems interfering with wide clinical use of nanosized particles - possible toxic action of nanoparticles, mechanisms of their deducing from an organism, risks concern the vessels, congestion of magnetic particles within vascular region of target area etc. [4,5]. All these problems demand the further researches in the field of synthesis and working out technologies of preparation of biocompatible nanostructured polymeric compositions, biomedical technologies for the decision of the above-stated problems.

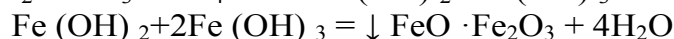
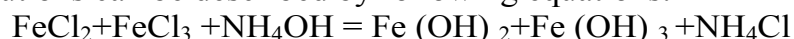
In the present work dynamic light scattering (DLS) and an electron magnetic resonance (EMR) methods are used to control of synthesis process and characterize nanosized magnetic particles of iron oxides in polyethyleneglycol/water solutions. The results on magnetic liquids with polar bases (ethylene glycol (EG), polyethylene glycol (PEG), pentanole, water) also are presented.

EXPERIMENTAL PART

Nanosized particles of iron oxides are received by chemical sedimentation from a solution of chlorides of iron (II, III). EMR spectra are registered on radio spectro-meter JES-PE-3X, JEOL (Japan) working at frequency 9.3GHz. Values of magnetic-resonance parametres were determined by comparison of experimental and calculated according to [6] EMR spectra. Calculations were executed have shown that the peak width, resonance fields and the form of lines as a whole are well enough adjusted under experimental spectra approximated by representation of the EMR line by a Combinations of Gauss and Lorentz type functions. The sizes of particles formed in solutions and their distribution were investigated by dynamic light scattering with use of LB-550 Analyzer, Horiba, Japan.

RESULTS AND DISCUSSION

The formation of nanosized iron oxide particles from chlorides of iron(II) and iron (III) in water solutions can be described by following equations:



In Fig.1 DLC picture of distribution of particles in the sizes in water/PEG/iron salt solutions at 20° is shown.

The number of iron clusters essentially depend on a ratio iron salt/peg. So, in water-polymer solutions at a ratio iron salt/peg=1:1 three kinds of clusters are registered at least. These clusters co-exist in dynamic equilibrium and their intensities depend on the temperature of registration. In the given system capture of iron particles by peg molecules leads to formation of pegylated iron oxide particles with the linear sizes from 100 to 600 nanometers (Fig.1).

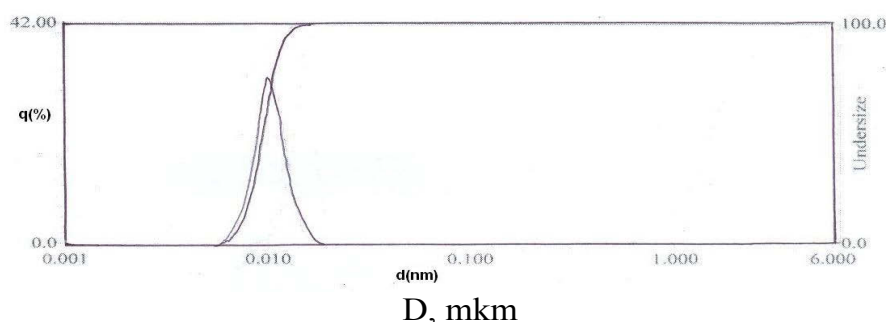


Fig. 1.

Distribution of particles in the sizes in the system $\text{FeCl}_2/\text{FeCl}_3/\text{NH}_4\text{OH}/\text{PEG}/\text{H}_2\text{O}$ at a ratio (mole to mole) peg: iron salt = 1:1

EMR spectra of the system $\text{FeCl}_2/\text{FeCl}_3/\text{NH}_4\text{OH}/\text{PEG}/\text{H}_2\text{O}$ at various ratio peg:iron salt (mole to mole) are presented in Fig.2. Apparently, experimental EMR spectra at room temperature represent asymmetric single lines with the effective g-factor $2.16 \div 2.31$ and width $750 \div 1350\text{Gs}$. The sizes of magnetic particles in investigated systems, their complexes with PEG were defined from EMR spectra by a technique described in [4] using own program of calculation. Modelling calculations have been executed for the systems differing in the ways of preparation. The sizes of particles estimated from EMR spectra in various conditions of carrying out of experiments, have made from 3 to 22 nanometers. It is established that at introduction of certain concentration low-molecular PEG in a water solution of iron salts magnetite particles are stabilised in the small sizes. In Fig.3 the position of resonance point as a function of temperature is presented for the polymeric films received from water/peg solutions (0.03÷10wt.% of magnetic particles). There is a sharp change of position of the centre of a signal - i.e. shift to lower fields. The shift reason is formation of linear chains of magnetic iron oxide in a spectrometer magnetic field.

Thus, application of DLS and EMR methods show the formation of pegylated particles of iron oxides in a wide range of sizes (beginning from 120nm) and possibility to control of magnetic iron clusters formations of different sizes and distribution in water, water/polymer dispersions. Liquids are stabilized by means of a double layer of various combinations of the surface-active substances providing steric pushing away between magnetic nanoparticles [5]. Various types of the spatial structural organisation of investigated ML on the nanoscale [6,7] are found out.

The structure of highly stable ML based on pentanole is similar to that for ML on not polar organic bases (for example, benzene) with an unary stabilising layer of used surfactant. At the same time, influence of interpartial interaction on dispersion is stronger

in such polar ML because of differences in structure of covers. At rise in temperature (to 80°C) it is observed adsorption of a layer of surfactant which is shown in occurrence in ML a small amount large (the size more than 100 nanometers) agglomerates. The interesting fact is that the given effect begins long before a boiling point of pentanole and is shown the more strongly, than less volume fraction of nanoparticles stabilised in ML.

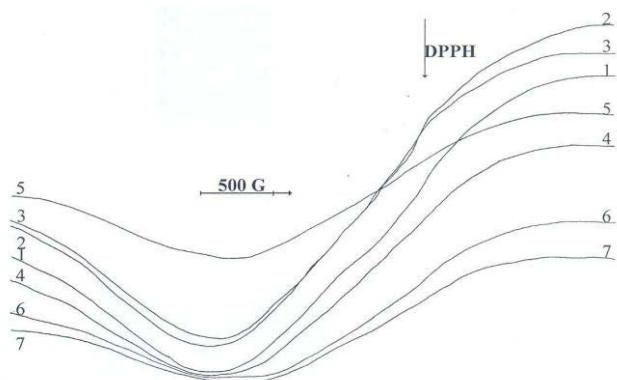


Fig. 2.

EMR spectra at 293K of iron oxides particles in water/peg system, where iron:peg ratio (mole to mole) is: 1 - 1:1; 2 - 1:3; 3 - 1:5; 4 - 1:10; 5 - 1:20; 6 - 1:50; 7 - 1:100.

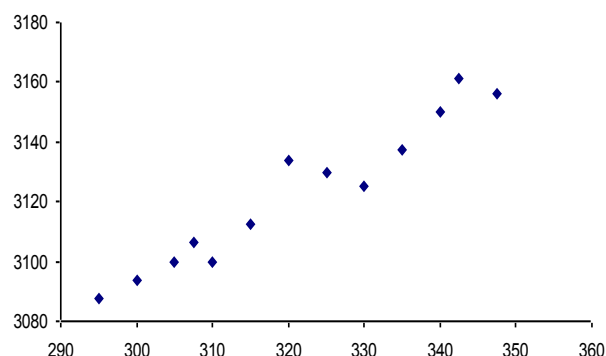


Fig.3.

Dependence of position of EMR signal of doped with magnetic iron oxide particles PEG film as a function of temperature.

Structure of ML on a basis of polyethylene glycol and water strongly differs from structure of previous class of ML. In them formation of big (particle size more than 100 nanometers) extended or fractal units even for lack of an external magnetic field is fixed. The given fact answers lower stability of these kinds ML. The structure of fractal units in water ML does not depend on concentration of particles, but is sensitive to liquid temperature. The temperature increase (to 80°C) leads to reduction of fractal dimensions of units, reflecting their gradual destruction. At temperature returning to room values return growth of aggregation is observed. Also it is revealed that the given units in water ML consist from small (the size about 10 nanometers) primary associates which are steady against temperature.

1. Q.A.Pankhurst, J.Connolly, S.K.Jones, J.Dobson, *Applications of magnetic nanoparticles in biomedicine*, *J. Phys. D. Appl. Phys.*, **36** (2003) 167-181.
2. Walther W.Tscharnutter, *Mobility measurements by phase analysis*, *Applied Optics* **40** (2001) 3995-4003.
3. Y.Qiang, J.Antony, A.Sharma, J.Nutting, D.Sikes, D.Meyer, *Iron/iron oxide core-shell nanoclusters for biomedical applications*, *Journal of Nanoparticle Research*, **8** (2006) 489-496.
4. V.S.Kalambur, E.K.Longmire, *Cellular Level Loading and heating of superparamagnetic iron oxide nanoparticles*, *Langmuir*, **23** (2007) 12329-12336.
5. E.A.Masimov, B.Yu.Zaslavsky, T.O.Bagirov, A.A.Borovskaya, A.A.Gasanov, N.D.Gulaeva, Yu.Levin, *Aqueous biphasic systems formed by nonionic polymers. I Effects of inorganic salts on phase separation*, *Colloid and Polymer Science*, **264** №12 (1986) 349-355.
6. X-H.Peng et al., *Targeted Magnetic Iron Oxide Nanoparticles for Tumor Imaging and Therapy*, *International Journal of Nanomedicine*, **3** (2008) 311-321.
7. The structural organisation of a local environment of ions of Cu^{2+} in system $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}/\text{H}_2\text{O}/\Pi\Xi\Gamma$, *The bulletin of the Baku State University, a series physical and mathematical sciences*, №2 (1999) 15-29.

**NANOÖLÇÜLÜ DƏMİR OKSIDLƏRİ VƏ SU, SU-POLIETİLEN-QLIKOL ƏSASLI MAQNİT
MAYELƏRDƏ İŞİĞİN DİNAMİK SƏPİLMƏSİ VƏ ELEKTRON MAQNİT REZONANSI**

E.Ə.MƏSİMOV, E.H.İSMAYİLOV, Ç.R.FƏRƏCOV

Məqalədə işığın dinamik səpilməsi və elektron maqnit rezonansı metodlarının tətbiqi ilə dəmir oksidləri və su, su-polietilenqlikol əsaslı maqnit xassəli mayələr tədqiq edilmiş və göstərilmişdir ki, sistemdə reaksiya şəraitindən asılı olaraq müxtəlif qalınlıqda örtüyü olan peqləşdirilmiş nano-ölçülü dəmir oksidi zərrəcikləri əmələ gəlir.

**ДИНАМИЧЕСКОЕ РАССЕЯНИЕ СВЕТА И ЭЛЕКТРОННЫЙ МАГНИТНЫЙ
РЕЗОНАНС МАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ ЧАСТИЦ
ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА В РАСТВОРЕ ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЬ/ВОДА**

Э.А.МАСИМОВ, Э.Г.ИСМАИЛОВ, Ч.Р.ФАРАДЖЕВ

Методами динамического рассеяния света и электронного магнитного резонанса охарактеризованы наноразмерные кластеры оксидов железа в водных и вод/полиэтиленгликолевых растворах. Показано образование пегилированных наноразмерных частиц оксидов железа различной толщины оболочки в зависимости от условий проведения реакции.

Редактор: О.Касумов

УДК: 621. 315. 592

ВЛИЯНИЯ ИЗБЫТКА ТЕЛЛУРА И ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОНОКРИСТАЛЛОВ ТЕЛЛУРИДА СВИНЦА

Г.З.БАГИЕВА, Г.Д.АБДИНОВА, Н.Б.МУСТАФАЕВ

Институт Физики НАН Азербайджана

AZ1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33

bagieva-gjulandam@rambler.ru

поступила 16.05.2011

принята к печати 30.06.2011

Ключевые слова: монокристалл, термоэлектрический преобразователь, фотоэлектрический, преобразователь, зонная структура, отжиг, антиструктурные дефекты

РЕФЕРАТ

Избыточные атомы Те и отжиг при 473 и 573К существенно влияют на значения и характер температурных зависимостей электропроводности, коэффициентов термо-э.д.с. и Холла, а также на тип проводимости при низких температурах монокристаллов теллурида свинца, что обусловлено акцепторным действием избыточных атомов теллура и образованием антиструктурных дефектов в результате размещения атомов Те при отжиге в вакансиях подрешетки свинца.

Теллурид свинца и твердые растворы на его основе используются для изготовления термоэлектрических и фотоэлектрических преобразователей различного назначения. Особенности электронной зонной структуры и кристаллизации, высокая диэлектрическая проницаемость и т. д. делают эти материалы также интересными объектами для исследования механизмов различных физических явлений в полупроводниках.

Теллурид свинца кристаллизуется в решетке типа NaCl со значительным отклонением от стехиометрии, что обуславливает наличие порядка $10^{18} \div 10^{19} \text{ см}^{-3}$ электрически активных собственных дефектов (например, вакансий в подрешетках свинца и теллура). При этом вакансии халькогена (избыток атомов свинца) дает 2 электрона, а вакансии свинца (избыток теллура) - 2 дырки [1,2]. Поэтому концентрация носителей тока в кристаллах PbTe, в первую очередь, будет определяться отклонением состава от стехиометрии, т. е. от избытка того или другого компонента в образце. Распределение и состояние избыточных атомов данного компонента, а также концентрация структурных дефектов должны зависеть также от режима термообработки образца [3]. Поэтому для получения информации о роли структурных дефектов в явлениях переноса носителей заряда в халькогенидах свинца в данной работе выращены и исследованы электрические свойства монокристаллов PbTe, непрошедших термической обработки и предварительно прошедших обработки при температурах 473 и 573К, содержащих дополнительно введенный избыточный теллур в количестве до 0,1ат%. Монокристаллы PbTe с избытками теллура (до 0,1ат.%) были выращены методом Бриджмена. Режимы синтеза и выращивания монокристаллов соответствовали режимам, приведенных в [4], монокристалличность слитков подтверждена рентгеновским методом. Из монокристаллических слитков на электроэрозионной установке вырезались для исследования образцы в виде прямоугольных параллелепипедов с геометрическими размерами 3x5x12мм. Удаление нарушенного слоя, образующегося на поверхности образцов при резке,

осуществлялось химическим травлением. Термообработка образцов проводилась в среде спектрально чистого аргона при температурах 473 и 573K в течение 120 часов.

Электрические параметры (электропроводность σ , коэффициенты термо-э.д.с. α и Холла R) измеряли на постоянном токе зондовым методом вдоль длины образца (слитка) в интервале температур 77÷300K.

Результаты измерений представлены на Рис.1-Рис.4. Видно, что малые избытки теллура сильно влияют на значения σ , α и R при 77K и характер температурных зависимостей электропроводности и коэффициента Холла неотожженного образца. Так, σ стехиометрического (синтезированный из стехиометрической шихты) неотожженного образца в интервале ~130÷240K с температурой растет с энергией активации ~0,1эВ, а коэффициент Холла падает. Значение σ образцов с избытком Te по сравнению со значением электропроводности стехиометрического образца при 77K в ~600÷1000 раз больше, а $\sigma(T)$ для этих образцов носит металлический характер. Зависимость электропроводности от концентрации избыточного Te в образцах, т.е. $\sigma(N_{Te})$ хорошо коррелируется с зависимостями $R(N_{Te})$ и $\alpha(N_{Te})$ при 77K. Знаки α и R как стехиометрического образца, так и образцов с избытком теллура положительные.

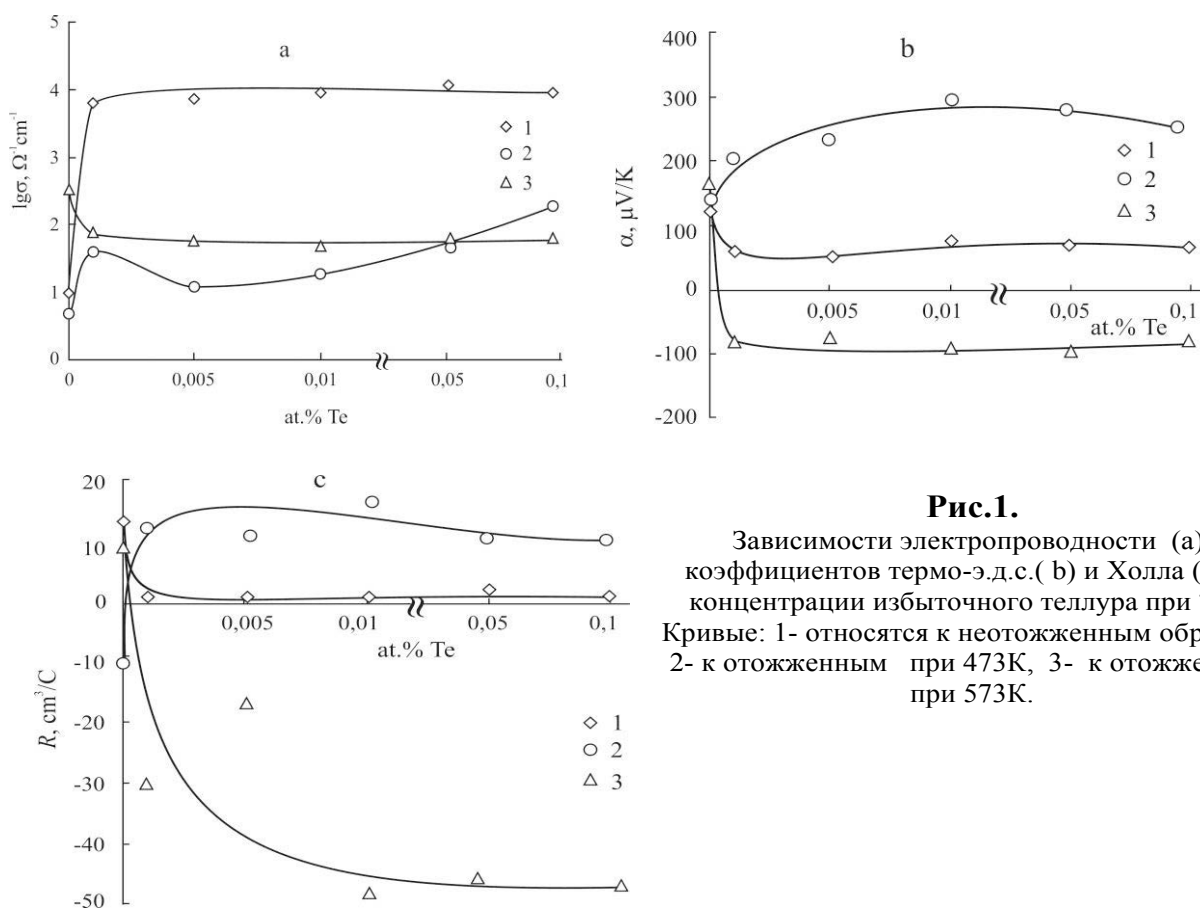


Рис.1.

Зависимости электропроводности (а), коэффициентов термо-э.д.с. (б) и Холла (с) от концентрации избыточного теллура при 77K. Кривые: 1- относятся к неотожженным образцам, 2- к отоженным при 473K, 3- к отоженным при 573K.

После отжига при 473K в течение 120 часов значения σ при 77K для всех образцов с избытком Te, по сравнению с неотожженными образцами, сильно падают (в ~50÷500 раз), и $\sigma(T)$ в них при температурах ниже 150÷110K обладают полупроводниковым характером (Рис.3). Для стехиометрического состава температурная область, где наблюдался полупроводниковый характер $\sigma(T)$, сужается (от ~130÷240K до ~130÷180K). Однако характер зависимости σ от

концентрации избыточного теллура сохраняется. Образцы с избытком теллура обладают p -типом проводимости в интервале температур $\sim 77 \div 300\text{K}$. При этом отжиг сопровождается ростом значений R и α образцов с избытком теллура.

Холловская концентрация и подвижность дырок при $\sim 130\text{K}$ в образцах с избытком теллура, отожженных при 473K , составляют $\sim 3,7 \cdot 10^{17} \div 7,4 \cdot 10^{17}\text{см}^{-3}$ и $\sim 1500 \div 7000\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ (принимается, что при этой температуре носители тока рассеиваются на колебаниях решетки), соответственно. В случае неотожженных образцов с избытком теллура концентрация и подвижность дырок в этой области температур составляют $\sim 7,2 \cdot 10^{18} \div 1,2 \cdot 10^{18}\text{см}^{-3}$ и $1500 \div 3300\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ соответственно (концентрация дырок в стехиометрическом неотожженном образце при 77K равна $\sim 5 \cdot 10^{17}\text{см}^{-3}$).

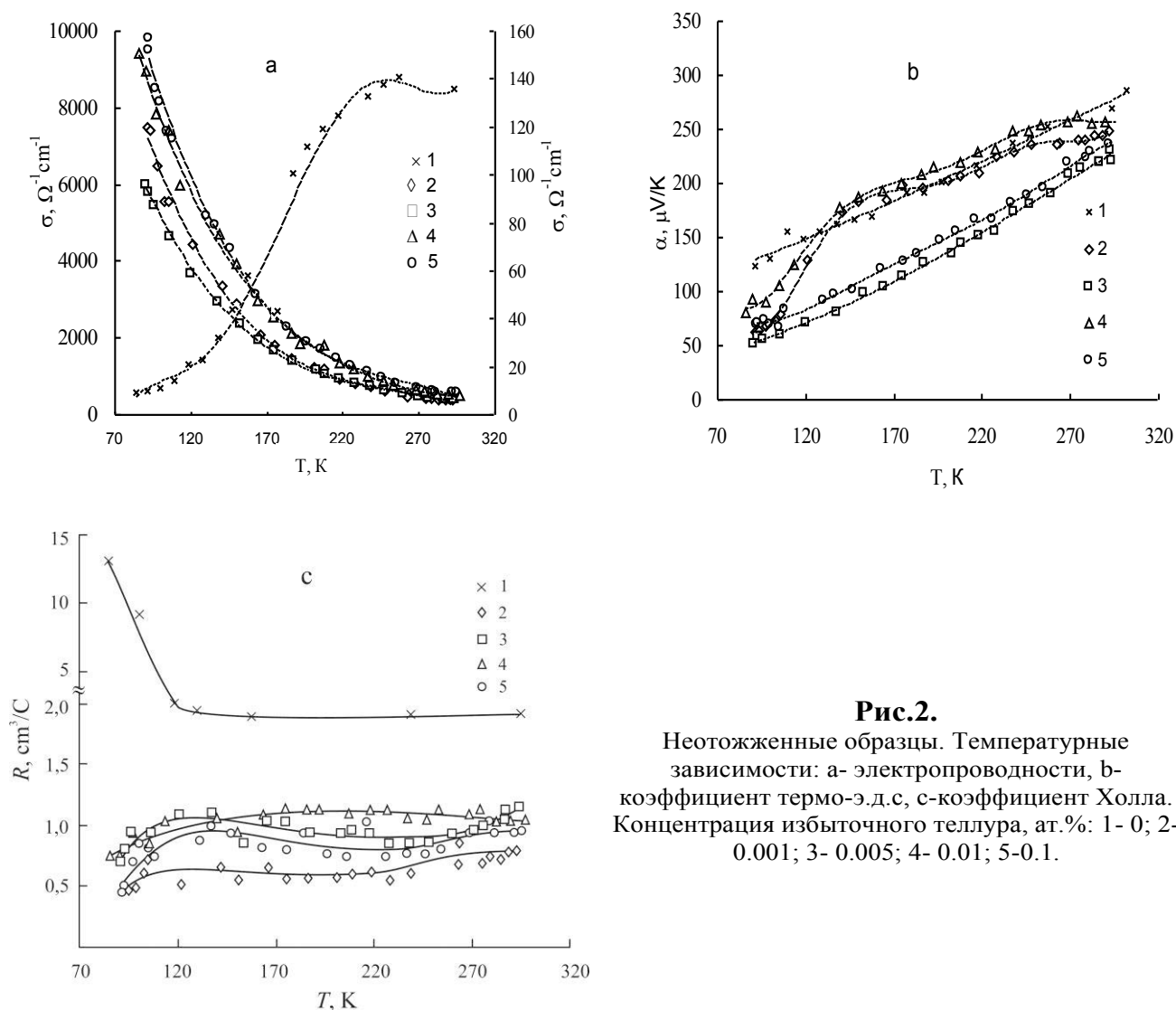


Рис.2.

Неотожженные образцы. Температурные зависимости: а- электропроводности, б- коэффициент термо-э.д.с, с-коэффициент Холла. Концентрация избыточного теллура, ат. %: 1- 0; 2- 0.001; 3- 0.005; 4- 0.01; 5-0.1.

Знаки коэффициентов термо-э.д.с. и Холла образцов с избытком теллура, прошедших отжиг при 573K , при низких температурах отрицательные (Рис.4). С ростом температуры абсолютные значения α и R для этих образцов уменьшаются; при некоторых температурах (для α при $\sim 130 \div 170\text{K}$, а для R при $\sim 170 \div 220\text{K}$) α и R меняют свой знак с отрицательного на положительный, а затем α с температурой растет, а R почти не меняется. Значение коэффициента термо-э.д.с. стехиометрического состава после отжига при 573K несколько растет по

сравнению с неотожженным образцом и остается положительным (как и R) во всем интервале температур. При температурах ниже $\sim 140\text{K}$ характер $\sigma(T)$ образцов с избытком теллура металлический, в интервале $\sim 140\div 220\text{K}$ полупроводниковый, а выше $\sim 220\text{K}$ опять металлический. В случае стехиометрического образца полупроводниковый характер $\sigma(T)$ наблюдается только в интервале температур $\sim 77\div 100\text{K}$.

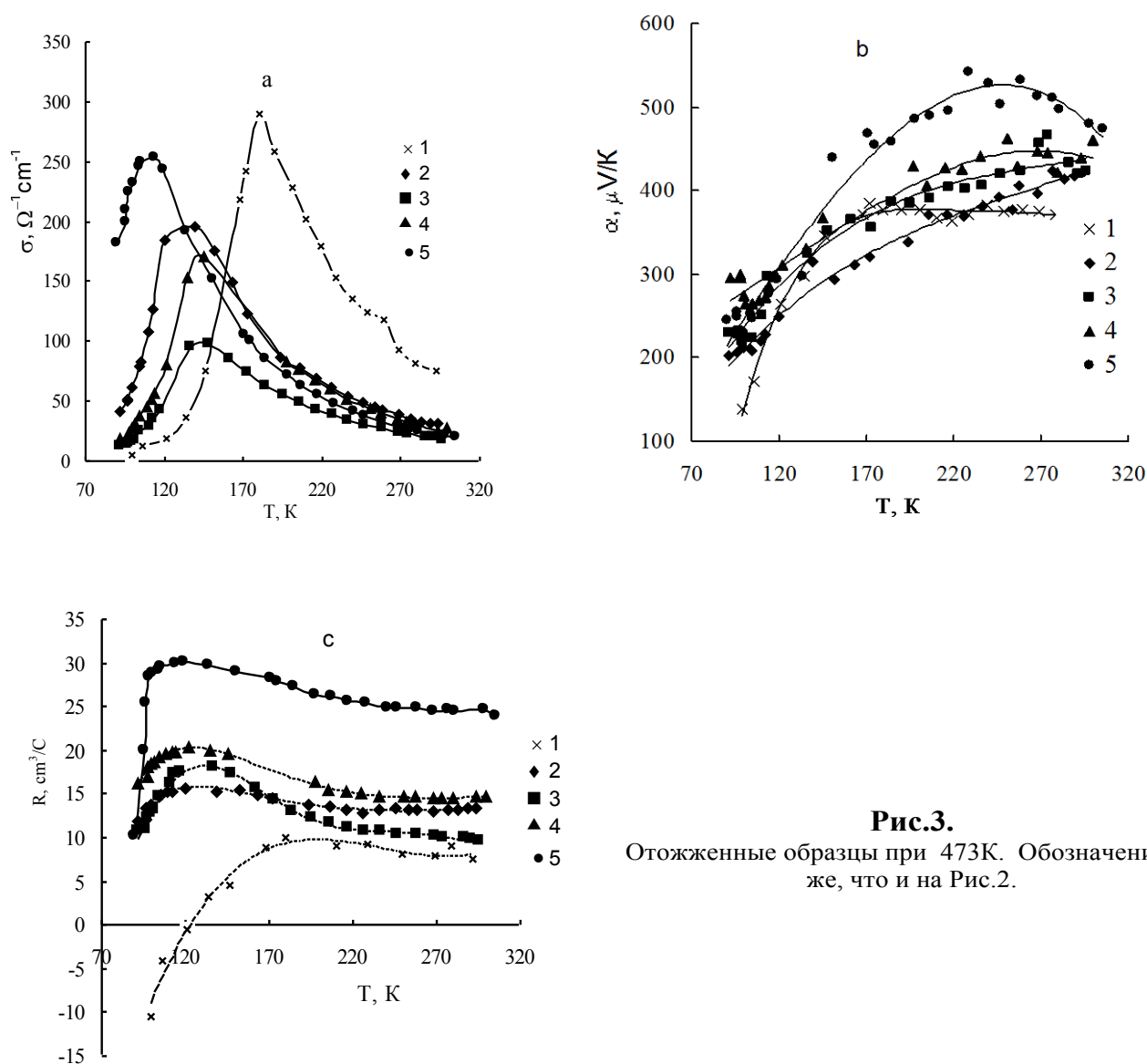


Рис.3.
Отожженные образцы при 473K. Обозначения те же, что и на Рис.2.

Согласно [5], полупроводниковый характер $\sigma(T)$ стехиометрического неотожженного образца монокристаллов PbTe в интервале температур $\sim 130\div 240\text{K}$ обусловлен существованием в их запрещенной зоне акцепторных уровней с энергией активации $\sim 0,1\text{эВ}$. В [6,7] на основе результатов исследования по влиянию отжига на электрические свойства монокристаллов PbTe сделано заключение, что эти уровни связаны с дефектами, вызванными макронапряжениями и неоднородным распределением атомов сверхстехиометрического теллура вдоль слитка, возникающими в процессе выращивания кристаллов PbTe .

Избыточные атомы теллура в неотожженных образцах PbTe, играя роль акцепторов, дают дополнительные дырки в валентной зоне, что приводит к уменьшению коэффициентов Холла и термо-э.д.с. и увеличению концентрации дырок и электропроводности, а также к металлическому характеру $\sigma(T)$ во всем интервале температур (от 77 до 300K).

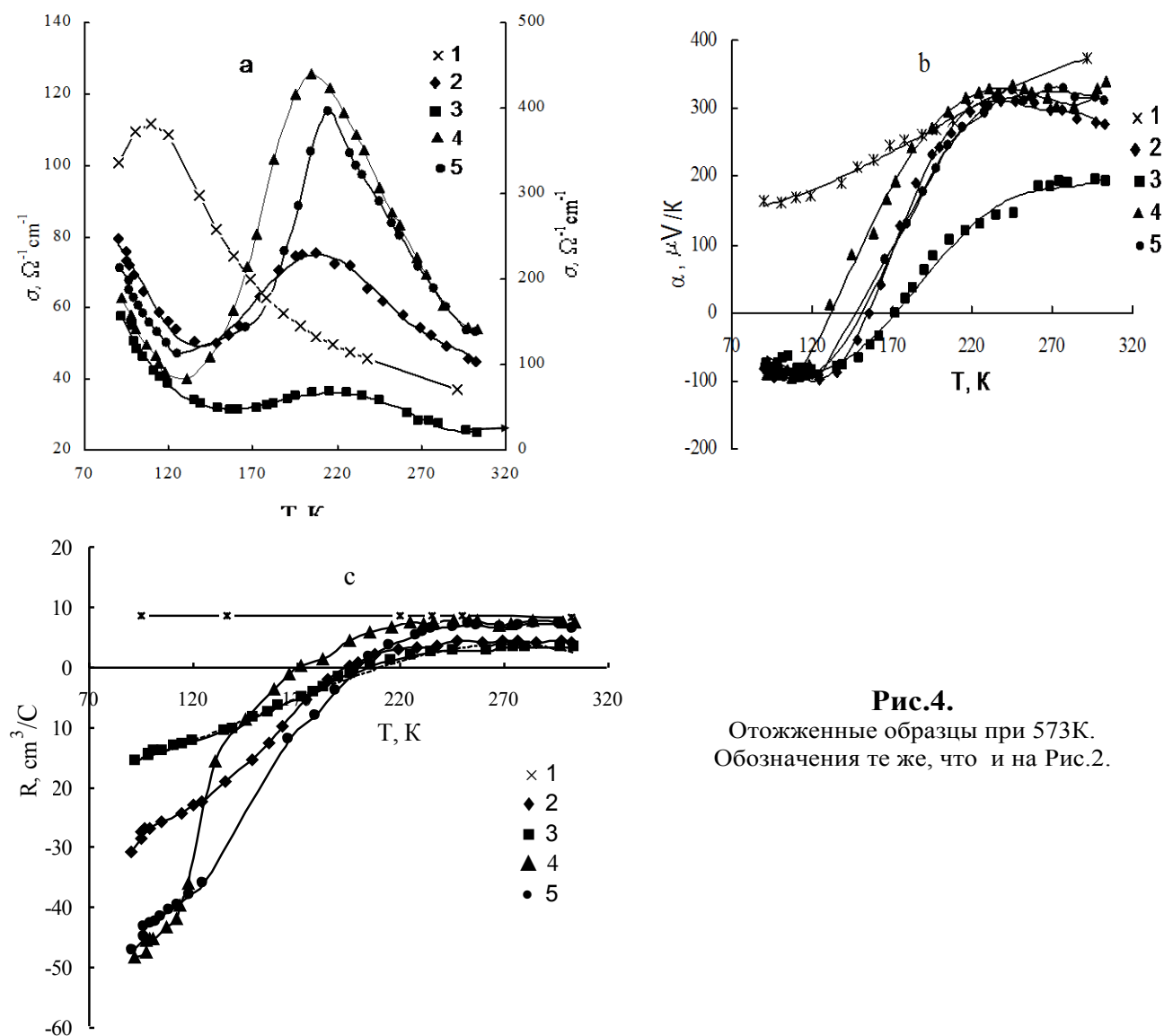


Рис.4.

Отожженные образцы при 573K.
Обозначения те же, что и на Рис.2.

Особенности фазовой диаграммы PbTe затрудняют приготовление близкой по составу к стехиометрии кристаллов. Введенные избыточные атомы теллура могут располагаться либо в междоузлиях, либо в узлах подрешетки свинца (антиструктурные дефекты), либо в узлах своей решетки, но при одновременном образовании вакансий в подрешетке свинца. В зависимости от расположения избыточных атомов Te будут возникать разные по электроактивности точечные дефекты.

По-видимому, при отжиге образцов с избытком Te при 473K часть избыточных атомов Te, расположенных преимущественно в междоузлиях, диффундируя, располагаются в вакансиях подрешетки свинца, т.е. образуются антиструктурные дефекты (атомные радиусы Te и Pb соответственно равны 1,70 и 1,75Å). Этот процесс приводит к уменьшению концентрации дырок, обусловленных как избыточным теллуром, так и вакансиями в подрешетке свинца.

Поэтому коэффициент Холла и термо-э.д.с. образцов с избытком теллура после отжига при 473К растут, электропроводность уменьшается и на кривых зависимостях $\sigma(T)$ обнаруживаются участки с полупроводниковым характером, связанные с акцепторными центрами с энергией активации $\sim 0,1\text{эВ}$. Отжигом образцов при 573К диффузия и степень размещения атомов избыточного теллура в вакансиях подрешетки свинца усиливается, вследствие чего концентрация дырок в образцах претерпевает дальнейшее уменьшение, что приводит к превалированию электронной проводимости (т.е. к отрицательному знаку α и R) при $\sim 77\text{К}$. С ростом температуры за счет ионизации акцепторных центров с энергией активации $\sim 0,1\text{эВ}$ превалирует дырочная проводимость, что приводит к инверсии знака коэффициентов термо-э.д.с. и Холла.

Рост коэффициента термо-э.д.с. с температурой неотожженных и отожженных образцов PbTe стехиометрического состава и составов с избытком теллура объясняется существованием второй валентной зоны (зоны тяжелых дырок) с относительно большой эффективной массой (около $1,2m_0$). В PbTe , кроме главного L -экстремума валентной зоны, имеется второй дополнительный максимум в точке Σ [1,8]. Энергетический зазор между краями тяжелых и легких дырок при низких температурах равен $\sim 0,17\text{эВ}$. С ростом температуры ширина запрещенной зоны уменьшается, $E_g/\Delta T \approx 4 \cdot 10^{-4} \text{эВ/К}$ при $T > 50\text{К}$, а зазор между двумя максимумами валентной зоны уменьшается с температурой приблизительно с той же скоростью. Поэтому эффективные массы вблизи L -экстремумов изменяются приблизительно пропорционально E_g при вариациях температуры, что обуславливает значительную температурную зависимость эффективных масс и, вследствие этого, коэффициента термо-э.д.с.

Вышеприведенные данные свидетельствуют о том, что введенные дополнительные атомы Te , создавая новые носители тока (дырки), существенно изменяют значения и характер температурных зависимостей электрических параметров монокристаллов этого соединения. С отжигом образцов монокристаллов PbTe при различных температурах происходит заживление структурных деформационных дефектов и процесс некоторого размещения дополнительно введенных атомов теллура в вакансиях подрешетки свинца, что также сопровождается изменением значения и характера температурных зависимостей электрических параметров, а также типа проводимости при низких температурах.

Таким образом, исследования электрических свойств неотожженных и отожженных при 473 и 573К в течение 120 часов образцов монокристаллов PbTe с избытком (до 0,1ат.%) теллура показали, что избыточные атомы Te и термическая обработка существенно влияют на значения и характер температурных зависимостей этих свойств, а также на знак коэффициентов α и R при низких температурах. Предполагается, что это обусловлено акцепторным действием избыточных атомов теллура и образованием антиструктурных дефектов в результате размещения атомов Te в вакансиях подрешетки свинца.

1. Ю.И.Равич, Б.А.Ефимова, И.А.Смирнов, *Методы исследования полупроводников в применении в халькогенидах свинца PbTe , PbSe , PbS* Москва, «Наука», (1968) 383.
2. С.А.Немов, Ю.И.Равич, *Примесь таллия в халькогенидах свинца: методы исследования и особенности*, УФН, **168** (1998) 818-842.
3. С.С.Горелик, М.Я.Дашевский, *Материаловедение полупроводников и диэлектриков*. Москва, «Металлургия», (1988) 574.

4. З.Ф.Агаев, Э.М.Аллахвердиев, Г.М.Муртузов, Д.Ш.Абдинов, *Выращивание и электрические свойства кристаллов твердых растворов $Pb_{1-x}Mn_xTe$, Неорганические материалы*, **39** (2003) 543-545.
5. Н.Б.Мустафаев, Г.З.Багиева, Г.А.Ахмедова, З.Ф.Агаев, Д.Ш.Абдинов, *Неоднородность электрических свойств монокристаллов $PbTe$ в направлении роста, ФТП*, **43** (2009) 149-151.
6. Г.А.Ахмедова, Г.З.Багиева, З.Ф.Агаев, Д.Ш.Абдинов, *О природе глубоких акцепторных уровней в запрещенной зоне неотожженных образцов монокристаллов $PbTe$, ФТП*, **43** (2009) 1456-1459.
7. Г.А.Ахмедова, Г.Дж.Абдинова, Д.Ш.Абдинов, *Влияние отжига на электрические свойства монокристаллов $PbTe$, легированных таллием, ФТП*, **45** (2011) 149-151.
8. R.N.Tauber, A.A.Machonis, I.B.Cadoff, *Thermal and optical energy gaps in $PbTe$, J.Appl.Phys.*, **37** (1966) 4855-4860.

TELLUR ARTIQLIĞININ VƏ TERMİK İŞLƏNMƏNİN QURĞUŞUN TELLURİD MONOKRİSTALLARININ ELEKTRİK XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

G.Z.BAĞIYEVA, G.C.ABDİNOVA, N.B.MUSTAFAYEV

Göstərilmişdir ki, artıq Te atomları və 473 və 573K-də aparılan termik işlənmə $PbTe$ monokristallarının elektrik parametrlərinin qiymətinə və temperatur asılılığına, habelə keçiriciliyinin tipinə güclü təsir göstərir. Buna səbəb artıq tellur atomlarının akseptor təsiri və termik işlənmə zamanı artıq tellur atomlarının qurğuşun alt qəfəsindəki vakansiyalarda yerləşərək antistruktur defektlər yaratmasıdır.

INFLUENCE OF TELLURIUM EXCESS AND HEAT TREATMENT ON ELECTRICAL PROPERTIES ON THE LEAD TELLURIDE SINGLE CRYSTALS

G.Z.BAGIYEVA, G.D.ABDİNOVA, N.B.MUSTAFAYEV

The excess Te atoms, and annealing at 473 and 573K substantially has effected on the value and nature of the temperature dependence of electrical conductivity, thermo-e.m.f. and Hall coefficients as well as on the type of conductivity at low temperatures of lead telluride single crystals, which is due to the acceptor effect of excess tellurium atoms and the formation of antisite defects as a result of placement of Te atoms during annealing in vacancies of lead sublattice.

Редактор: Г.Аждаров

УДК: 538.935

ЭНЕРГИЯ ФЕРМИ ПОЛУМЕТАЛЛИЧЕСКОГО СПЛАВА $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ В ОБЛАСТИ ТЕМПЕРАТУР 77–300К

Э.Р.ЮЗБАШОВ, Б.А.ТАИРОВ, М.А.АКПЕРОВ

*Институт Физики НАН Азербайджана
AZ1143, г.Баку, пр. Г.Джавида, 33
eltaj100@yahoo.com*

поступила 28.03.2011
принята к печати 23.05.2011

РЕФЕРАТ

Рассчитана температурная зависимость энергии Ферми электронов для различных моделей дисперсии энергетического спектра электронов в монокристаллах сплава $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ в области температур 77÷300К.

Ключевые слова: полуметаллический сплав, энергия Ферми, эллипсоидально-непараболическая модель (ENP), неэллипсоидально-непараболическая модель (NENP)

Изучение физических свойств Bi и его сплавов с сурьмой имеет большое значение как с теоретической, так и экспериментальной и практической сторон. Теоретический интерес вызван тем, что благодаря характерным энергетическим параметрам данных объектов легко можно проследить эволюцию полуметаллического, бесщелевого, полупроводникового состояний, а также различные топологические переходы, как, например, образование гантелеобразной формы, разделение и слияние электронных энергетических квазиэллипсоидов. Экспериментальный интерес вызван тем, что в системе Bi-Sb легко можно создать экспериментальные условия для наблюдения различных квантовых и размерных эффектов. Практический интерес к этим материалам, главным образом, вызван тем, что на их основе можно создать высокоэффективные малогабаритные источники глубокого охлаждения, комбинируя термоэлектрические, магнитотермоэлектрические и гальванотермоманитные эффекты. В последнее время эти материалы широко исследуются также в тонкопленочных и наноразмерных формах [1-3].

Несмотря на то, что эти материалы изучаются давно, все еще имеются некоторые вопросы, которые не имеют однозначного и точного ответа. Это, в основном, относится к некоторым параметрам энергетического спектра твердых сплавов Bi-Sb в области промежуточных и высоких температур.

Проблема определения энергии Ферми электронов в Bi и его сплавах с сурьмой при температурах выше 77К довольно сложна вследствие сильной температурной зависимости параметров L -зоны и малой величины энергетического зазора в L точке зоны Бриллюэна. В данной области температур для определения энергии Ферми носителей заряда обычно используют два разных метода: метод плотности носителей заряда (концентрационный) и метод термоэдс. Для Bi эта проблема рассмотрена в работах [4-6]. В отличие от прежних работ [см., например, 7], в вышеуказанных работах для оценки изменения уровня Ферми электронов с температурой были использованы экспериментально определенные [8] температурные зависимости энергетического зазора в L -точке (ε_{g_L}) и циклотронные массы электронов.

В данной работе, используя идеи развитые в работах [4,5], при помощи метода плотности носителей заряда рассчитана температурная зависимость энергии Ферми полуметаллического сплава $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ в области температур 77÷300К. Для расчета энергии Ферми необходимо знать определенный набор экспериментальных

данных, таких как температурная зависимость концентрации электронов, температурные изменения энергетического зазора (ε_{gL}) и циклотронных эффективных масс электронов.

Данные по температурной зависимости концентрации электронов и дырок в сплаве $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ взяты из нашей статьи [9]. Температурное изменение энергетического зазора в точке L зоны Бриллюэна (ε_{gL}) для данного сплава, а также температурная зависимость циклотронной эффективной массы легких бинарных электронов определялась аппроксимацией данных Векки и др. [10]. Результаты аппроксимации таковы

$$\varepsilon_{gl} = \left| -3.146 - 1.487 \cdot 10^{-2} \cdot T + 6.229 \cdot 10^{-4} \cdot T^2 \right| \quad (\text{mev}) \quad (1)$$

$$\frac{m_{Lbn}^c}{m_0} = \left| -2.821 \cdot 10^{-3} + 2.3835 \cdot 10^{-5} \cdot T + 1.1635 \cdot 10^{-7} \cdot T^2 \right| \quad (2)$$

Отрицательный знак в формулах (1) и (2) связан с инверсией L_C и L_V зон (в расчетах использованы абсолютные значения ε_{gL} и m_c). Значения величин, определяемых по формулам (1) и (2) вблизи $T=84\text{K}$ стремятся к нулю, что согласуется с выводами [10].

Для определения компонент тензора эффективных масс электронов на уровне Ферми использовались данные работ [11,12], а для компонент тензора эффективных масс дырок - данные работы [13]. Для нахождения компонент тензора эффективных масс электронов на дне L зоны, в случае эллипсоидально-непараболической модели (ENP) для электронов, применялись следующие нормирующие формулы [14]

$$m_i(0) = \frac{m_i(\varepsilon_F)}{1+2\lambda}, \quad (3)$$

где $i=1,2,3$ указывают главные оси энергетического эллипсоида, $m_i(0)$ – компоненты тензора эффективных масс на уровне Ферми, вычисленные на основе эллипсоидально-параболической модели (EP), m_i – те же массы на дне L зоны; $\lambda = \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_g}$, где ε_F – уровень Ферми электронов, ε_g – энергетический зазор в L - точке

зоны Бриллюэна (Оба значения берутся при гелиевых температурах). А для неэллипсоидально-непараболической модели (NENP), использовались следующие формулы [14]

$$\begin{aligned} m_1(0) &= \frac{m_1(\varepsilon_F)}{1+2\lambda}, \\ m_2(0) &= \left[\frac{\pi}{2} \right]^2 \frac{r^2(1+2r)m_2'(\varepsilon_F)}{(1+\lambda+\lambda r)[K(k)+(r-1)E(k)]}, \\ m_3(0) &= \frac{m_3(\varepsilon_F)}{1+2\lambda}, \end{aligned} \quad (4)$$

здесь $r = \frac{m_2}{m_1}$, m_2 – компонента тензора эффективной массы на дне L-зоны про-

водимости в направлении вытянутости электронного квазиэллипсоида, m_2' – то же самое, но на потолке валентной зоны в L-точке зоны Бриллюэна: $K(k)$ и $E(k)$ – полные эллиптические интегралы первого и второго родов (в данной работе для простоты, принято, что $r=1$). Чтобы пользоваться формулами (3) и (4) надо знать значение λ , то есть величину уровня Ферми электронов и величину ε_g при гелиевых температурах. Аппроксимационная формула (3) для $|\varepsilon_{gL}|$ дает значение $\sim 3.14 \text{ mev}$.

Можно пользоваться значениями ε_{gL} , найденными из работ Тиховольского и др. [15] ($\varepsilon_{\text{gL}} \approx 6 \text{ meV}$), или же Брандта и др. [16,17] ($\varepsilon_{\text{gL}} \approx 5.8 \text{ meV}$) или Ким и др. [18] ($\varepsilon_{\text{gL}} \approx 5.5 \text{ meV}$). Для значения уровня Ферми имеем $\varepsilon_F \approx 3.1 \text{ meV}$ [17] или $\varepsilon_F \approx 7.5 \text{ meV}$ [19]. Величину уровня Ферми для данного сплава можно определить из данных Акимова и др. [13], что дает величину $\varepsilon_F(EP) \approx 5.9 \text{ meV}$. Для определения $\varepsilon_F(ENP)$ использована формула [20]

$$\varepsilon_F(ENP) = \varepsilon_F(EP) - \frac{\varepsilon_g}{2} + \left[\left(\varepsilon_F(EP) \right)^2 + \frac{\varepsilon_g^2}{4} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5)$$

Из этой формулы видно, что при изменении ε_g от 0 до ∞ $\varepsilon_F(ENP)$ изменяется в интервале $\varepsilon_F(EP) \leq \varepsilon_F(ENP) \leq 2\varepsilon_F(EP)$. В нашем случае получается, что $5.9 \leq \varepsilon_F(ENP) \leq 11.8 \text{ (meV)}$.

Разброс в значениях ε_{gL} и ε_F для данного сплава связан с большими трудностями точного определения этих параметров для полуметаллических сплавов Bi–Sb из осцилляционных экспериментов [19]. Для компонент тензора эффективных масс дырок на дне Т зоны Бриллюэна приняты следующие значения, полученные из циклотронных эффективных масс дырок [13]: $m_1^h = m_2^h = 0.07m_0$; $m_3^h = 0.63m_0$.

Для описания температурной зависимости компонент тензора эффективных масс электронов, как и в работе [5], используются два допущения. В расчетах предполагается, что или все три элемента электронной массы имеют одну и ту же температурную зависимость

$$m_i(T) = m_i(0) \cdot f(T), \quad (6)$$

где

$$f(T) = \frac{m_{lb}^*(T)}{m_{lb}^*(0)} = \left| 1.0 - 11.98 \cdot 10^{-2} \cdot T + 2.655 \cdot 10^{-4} \cdot T^2 \right| \quad (7)$$

или же допускается, что тяжелая масса m_2 не зависит от температуры, в отличие от m_1 и m_3 .

Уровень Ферми электронов можно определить из следующей формулы

$$N = \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} \sqrt{m_1 m_2 m_3} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon^{\frac{3}{2}} A_n(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (8)$$

здесь N – полная концентрация электронов, локализованных в трех эллипсоидах в L-точке зоны Бриллюэна, m_1 , m_2 , m_3 – компоненты тензора эффективных масс электронов на дне L зоны, $f_0 = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon_n - \varepsilon_F}{k_0 T}} + 1}$ – функция распределения Ферми-Дирака,

A_n – в зависимости от принятой модели электронного спектра, принимает значение

$$A_n = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & EP \\ \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right)^{\frac{3}{2}} & ENP \\ \left(1 + \frac{1}{5} (r+5) \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right) & NENP \end{array} \right\} \quad (9)$$

Где, в нашем случае, $r=1$, а ε_g – энергетический зазор в L-точке зоны Бриллюэна.

Формулу (8) можно переписать и в другом виде

$$N = \frac{2\sqrt{2}}{\pi^2 \hbar^3} (\det m)^{1/2} (k_0 T)^{3/2} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x_n^{3/2} A_n(x) dx, \quad (10)$$

где

$$A_n = \left\{ \begin{array}{l} 1 \\ (1+\beta x)^{3/2} \\ \left(1 + \frac{6}{5}\beta x\right) \end{array} \quad \begin{array}{l} EP \\ ENP \\ NENP \end{array} \right\}, \quad (11)$$

здесь - $\beta = \frac{k_0 T}{\varepsilon_g}$; $x = \frac{\varepsilon}{k_0 T}$; $\eta = \frac{\varepsilon_F}{k_0 T}$.

Используя двухпараметрический

$$I_{n,k}^m(\eta, \beta) = \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \frac{x^m (x + \beta x^2)^n}{(1 + 2\beta x)^k} dx \quad (12)$$

и однопараметрический

$$F_{n+m}(\eta) = I_{n,k}^m(\eta, 0)$$

интегралы Ферми, формулы (10) и (11) можно переписать в удобной для расчета форме

$$N(EP) = CF \cdot (\det m)^{1/2} \cdot T^{3/2} \cdot F_{3/2}(\eta), \quad (12)$$

$$N(ENP) = CF \cdot (\det m)^{1/2} \cdot T^{3/2} \cdot I_{3/2,0}^0(\eta, \beta), \quad (13)$$

$$N(NENP) = CF \cdot (\det m)^{1/2} \cdot T^{3/2} \cdot \left[F_{3/2}(\eta) + \frac{6}{5}\beta \cdot F_{5/2}(\eta) \right]. \quad (14)$$

Сюда же можно добавить формулу, описывающую концентрацию дырок,

$$P = \frac{1}{3} \cdot CF \cdot (\det m_h)^{1/2} \cdot T^{3/2} \cdot F_{3/2}(\eta^h), \quad (15)$$

здесь $CF = \frac{(2k_0)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3}$, η^h – приведенный уровень Ферми дырок, определяемый по формуле $\eta^h = \frac{\varepsilon_F^h}{k_0 T}$.

При проведении расчетов уровня Ферми были использованы два набора данных по температурной зависимости концентрации электронов и дырок в сплаве $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.6}$ [9]: без учета вклада легких дырок в L точке зоны Бриллюэна, т.е. $N=P$, и с учетом вклада легких дырок, т.е. $N_L=P_L+P_T$, где P_L – концентрация легких дырок, локализованных в L точке зоны Бриллюэна, а P_T – концентрация тяжелых дырок, локализованных в T точке зоны Бриллюэна. График температурных зависимостей концентрации электронов и дырок в этом сплаве показана на Рис.1.

Результат расчета для первого набора данных ($N=P$) показан в Таблице 1, а для второго набора данных ($N_L=P_L+P_T$) - в Таблице 2.

В Таблицах 1 и 2 приняты следующие обозначения:

$E_F(NP)$ – величина энергии Ферми электронов, вычисленная из формулы (12); $E_F(ENP)$ – величина энергии Ферми электронов, вычисленная из формулы (13), с учетом предположения (6), т.е. $\det m(T) = f(T) \cdot \det m(0)$; $E_F(ENP_I)$ – величина энергии Ферми электрона, вычисленная из (13), с учетом предположения, что $m_2 = \text{const}$, а m_1 и m_3 изменяются с температурой согласно (7); $E_F(NENP)$ – величина энергии Ферми электрона, вычисленная из (14), с учетом предположения

Таблица 1.

Температурная зависимость энергии Ферми электронов, вычисленная по различным моделям энергетического спектра электронов для первого набора данных ($N = P$).

T, K	$E_F(EP)$, meV	$E_F(ENP)$, meV	$E_F(ENP_I)$, meV	$E_F(NENP)$, meV	$E_F(NENP_I)$, meV
77	26.74	23.03	7.15	18.8	6.95
90	30.61	20.03	6.67	20.2	7.16
110	39.12	3.69	3.09	12.3	7.12
130	49.04	-0.44	3.70	8.70	7.10
150	59.27	-4.50	3.84	5.45	6.85
170	71.41	-8.35	4.15	2.58	6.87
190	84.67	-12.34	4.38	-0.31	6.87
210	97.93	-16.79	4.22	-3.56	6.58
230	114.98	-20.67	4.82	-6.84	6.33
250	134.25	-24.47	5.64	-8.72	7.71
270	151.56	-29.20	5.58	-11.49	8.25
300	185.19	-35.33	6.81	-15.31	9.63

Таблица 2.

Температурная зависимость энергии Ферми электронов, вычисленная по различным моделям энергетического спектра электронов для второго набора данных ($N_L = P_L + P_T$).

T, K	$E_F(EP)$, meV	$E_F(ENP)$, meV	$E_F(ENP_I)$, meV	$E_F(NENP)$, meV	$E_F(NENP_I)$, meV
77	28.34	25.12	9.05	19.9	6.95
90	32.42	20.93	7.39	22.2	9.36
110	41.56	4.58	3.98	14.3	8.55
130	51.61	-0.43	4.61	9.13	9.17
150	62.24	-3.55	4.85	7.05	7.64
170	74.62	-7.38	5.19	3.78	6.12
190	88.07	-11.36	5.43	0.64	6.98
210	101.95	-15.69	5.42	-2.16	7.05
230	119.29	-19.56	6.04	-5.24	7.93
250	138.31	-23.50	6.73	-6.92	8.41
270	157.01	-27.95	6.98	-10.19	9.05
300	190.41	-34.24	8.04	-13.31	11.43

В Таблице 3. приведены значения энергии Ферми дырок, вычисленные из формулы (15).

Из сравнения полученных значений энергий Ферми электронов, приведенных в Таблицах 1 и 2, можно сказать, что учет вклада легких дырок приводит лишь к незначительному изменению полученных результатов. Поэтому можно ограничиться рассмотрением одного набора данных. Для наглядности данные Таблицы 1. представлены в графическом виде на Рис.2. Из рисунка видно, что в приведенном интервале температур энергия Ферми электронов, вычисленная по эллипсоидально-параболической модели (EP), имеет монотонно возрастающий характер. Температурные зависимости энергии Ферми электронов, вычисленные по эллипсоидально-непараболической (ENP) и неэллипсоидально-непараболической (NENP) моделям, для случая когда все три элемента электронной массы имеют одну и ту же температурную зависимость (6), имеют схожий вид и с ростом температуры уменьшаются, причем в случае эллипсоидально-непараболической (ENP) модели это уменьшение больше в количественном отношении. Температурные зависимости энергии Ферми электронов, вычисленные по эллипсоидально-

непараболической (ENP) и неэллипсоидально-непараболической (NENP) моделям для случая, когда $m_2=const$, а m_1 и m_3 изменяются с температурой согласно (7), также имеют схожий вид и с ростом температуры почти не меняются,

Таблица 3.

Температурная зависимость энергии Ферми дырок.

T, K	77	90	110	130	150	170	190	210	230	250	270	300
$\mathcal{E}_F^h$, meV	-2.071	-2.257	-2.332	-1.966	-1.497	-0.447	0.899	2.227	3.879	7.583	10.682	16.521

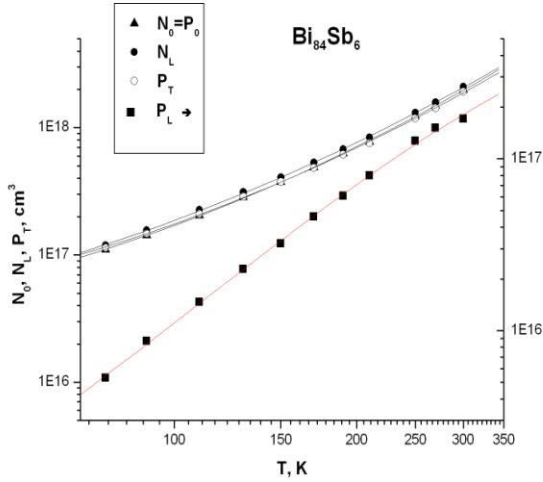


Рис.1.

Температурные зависимости концентрации электронов и дырок в твердом растворе $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.6}$ в интервале температур 77÷300K [9].

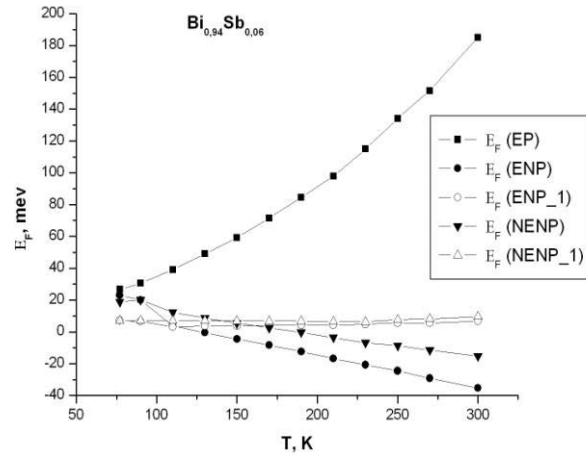


Рис.2.

Температурные зависимости энергии Ферми электронов, вычисленные по различным моделям энергетического спектра электронов в твердом растворе $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.6}$ в области температур 77÷300K.

Для проверки правильности использованной в данной работе программы была рассчитана температурная зависимость энергии Ферми электронов и дырок для чистого висмута при тех же исходных данных, что и в работах [5] и [21].

Результаты расчета показали хорошее согласие с результатами работ [5] и [21]. А вопрос, какая модель лучше описывает температурный ход энергии Ферми электронов, требует дальнейших исследований.

1. S.Dutta, V.Shubhaa and T.G.Ramesha, *Effect of pressure and temperature on thermopower of Bi-Sb alloys*. *Physica B: Condensed Matter*, **405** (2010) 1239-1243.
2. D.S.Choi, A.A.Balandin, M.S.Leung, G.W.Stupian, N.Presser, S.W.Chung, J.R.Heath, A.Khitun, K.L.Wang, *Transport study of a single bismuth nanowire fabricated by the silver and silicon nanowire shadow masks*, *Appl. Phys. Lett.* **89** (2006) 1503-1506.
3. S.Dutta, V.Shubha, T.G.Ramesh, Florita D'Sa, *Thermal and electronic properties of $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ alloys*, *Journal of Alloys and Compounds* **467** №1-2 (2009) 305-309.
4. I.F.Mikhail, O.P.Hansen, *The electron Fermi energy of bismuth at high temperatures*, *J. Phys. C: Solid State Physics*, **14** (1981) L27- L30.
5. J.Heremans, O.P.Hansen, *Influence of non-parabolisity on intravalley electron-electron scattering: The case of bismuth*, *J. Phys. C: Solid State Physics*, **12** (1979) 3483-3496.

6. H.Nielsen, *The intervalley scattering in Bi and its influence on the transport properties at intermediate temperatures*, *J. Phys. F: Metal Physics*, **8** №1 (1978) 141-150.
7. B.G.Martin, L.S.Lerner, *Band-Edge Calculations for Bismuth and Bismuth-Antimony Alloys*, *Phys. Rev. B: Solid State*, **6** N 8 (1972) 3032-3044.
8. M.P. Vecchi, M.S. Dresselhaus, *Temperature dependence of the band parameters*. *Phys. Rev. B: Solid State*, **10** N 2 (1974) 771-774.
9. E.Yuzbashov, B.Tairov, *Temperature dependence of the kinetic properties of alloy $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$* , *Fizika*, **16** №2 (2010) 317-320.
10. M.P.Vecchi, E.Mendez, M.S.Dresselhaus, *Temperature dependence of the band parameters in Bi and $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ alloys*, "Physics of Semoconductors", *Proceedings of the 13-th Intern. Conf., Rome*, (1976) 459-464.
11. W.Braune, U.Straubel, N.Kubicki, J.Lebech, K.Saermark, *Relaxation Time and Effective Masses for Charge Carriers in Semimetallic BiSb Alloys versus Alloy Composition*, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **106** (1981) 587-592.
12. W.Braune, G.Kuka, H.J.Gollnest, R.Herrman, *Microwave Spectroscopy in Semimetallic Bismuth-Antimony Alloys*, *Phys. Stat. Sol. (b)* **89** (1978) 95-101.
13. Б.А.Акимов, В.В.Мощалков, С.М.Чудинов, *Исследование эффекта Шубникова-Де Гааза в полуметаллических сплавах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$* , *ФНТ* **4** (1978) 60-74.
14. R.J.Dinger, A.W.Lawson, *Cyclotron Resonance and the Cohen Nonellipsoidal Nonparabolic Model for Bismuth*, *Phys. Rev. B: Solid State*, **3** (1971) 253-262.
15. E.J.Tichovolsky, J.G.Mavroides, *Magnetoreflexion studies on the band structure of bismuth-antimony alloys*, *Solid State Communs.*, **7** (1969) 927-931.
16. Н.Б.Брандт, Х.Диттманн, Я.Г.Понамарев, С.М.Чудинов, *Переход полупроводник–"квазиметалл"–полупроводник в сплавах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ под действием давления*, *Письма в ЖЭТФ*, (1970) **11** (1970) 250-253.
17. Н.Б.Брандт, С.М.Чудинов, *Осцилляционные эффекты в полуметаллических сплавах Bi-Sb под давлением*, *ЖЭТФ* **59** (1970) 1494-1507.
18. R.S.Kim, D.S.Kim, S.Narita, *$\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ alloys*, *Proceedings of III-rd Intern. Conf. on the Phys. of Narrow-gap Semicond.*, Warszawa, PWN, (1977) 764-768.
19. Г.А.Миронова, М.В.Судакова, Я.Г.Понамарев, *Закон дисперсии носителей в сплавах $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$* , *ФТТ*, **22** (1980) 3628-3634.
20. L.S.Lerner, K.F.Cuff, L.R.Williams, *Energy-band parameters and relative band-edge motions in the Bi-Sb alloy system near the semimetal-semiconductor transition*, *Reviews of Modern Physics*, **40** (1968) 770-775.
21. O.P.Hansen, E.Chervier, J-P.Michenaud, J.P.Issi, *Diffusion thermoelectric power of bismuth in a magnetic field*, *J. Phys. C: Solid State Physics*, **11** (1978) 1825-1840.

77–300K TEMPERATUR INTERVALINDA $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ YARIMMETAL XƏLITƏSİNİN FERMI ENERJISI

E.P.YÜZBAŞOV, B.A.TAHIROV, M.A.ƏKBƏROV

$\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ monokristallarında 77÷300K temperatur intervalında elektronların müxtəlif energetik dispersiya modelləri çərçivəsində malik olduqları Fermi enerjisinin temperatur asılılığı tədqiq edilmişdir.

FERMI ENERGY OF THE SEMIMETALLIC ALLOY OF $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ IN THE TEMPERATURE RANGE OF 77–300K

E.P.YUZHASHOV, B.A.TAIROV, M.A.AKBEROV

The temperature dependence electrons' Fermi energy has been studied by taking into account of various energetic band models (ENP, NENP) in $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ single in the temperature range of 77÷300K.

Редактор: Г.Аждаров

УДК 621.315.692

МОРФОЛОГИЯ ПОВЕРХНОСТИ ЭПИТАКСИАЛЬНЫХ ПЛЕНОК $Pb_{1-x}Sn_xSe$ И ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЕ p-n СТРУКТУРЫ НА ИХ ОСНОВЕ

И.Р.НУРИЕВ, А.М.НАЗАРОВ, Н.В.ФАРАДЖЕВ, С.С.ФАРЗАЛИЕВ,
Р.М.САДЫГОВ, В.Р.АЛИЕВА

*Институт Физики НАН Азербайджана
Баку, AZ1143, пр. Г.Джавида, 33
afinnazarov@yahoo.com*

поступила: 02.05.2011
принята к печати: 22.06.2011

ключевые слова: эпитаксиальные пленки, фоточувствительность, гомо-переходы, вольт-амперная характеристика, электронный микроскоп.

РЕФЕРАТ

На малогабаритном растровом электронном микроскопе (09ИОЭ-100-005) исследована морфология поверхности эпитаксиальных пленок $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0.03$) толщиной $0.5\div 1\text{ мкм}$, выращенных на свежесколотых гранях (111) BaF_2 методом конденсации молекулярных пучков в вакууме 10^{-4} Па . С применением дополнительного компенсирующего источника паров Se в процессе роста получены структурно совершенные пленки с чистой поверхностью свободной от черных скоплений, и на их основе созданы фоточувствительные p-n гомопереходы. Максимальная фоточувствительность наблюдается при $\lambda_{\text{max}}=7\text{ мкм}$.

ВВЕДЕНИЕ

Эпитаксиальные пленки узкозонных полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ и их твердые растворы широко применяются в инфракрасной (ИК) технике. На их основе созданы различные оптоэлектронные приборы [1].

Широко исследованы особенности роста структурно совершенных эпитаксиальных пленок твердых растворов $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0.05\div 0.07$), выращенных на различных подложках [2-6], и созданы изопериодические гетероструктуры $Pb_{1-x}Sn_xSe/PbSe_{1-x}S_x$. Получены p-n гомопереходы на основе $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0.01$).

В настоящей работе рассматривается влияние морфологии поверхности на электрофизические свойства эпитаксиальных пленок $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0.03$) толщиной $0.5\div 1\text{ мкм}$, выращенных на свежесколотых гранях (111) BaF_2 методом конденсации молекулярных пучков в вакууме 10^{-4} Па , и создание на их основе фоточувствительных p-n структур.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Известно, что структура поверхности кристаллов играет важную роль при изготовлении приборов [7], поэтому исследование морфологии поверхности в корреляции с электрофизическими и фотоэлектрическими свойствами кристаллов представляет научный и практический интерес. С применением дополнительного



компенсирующего источника паров Se во время роста определены оптимальные условия получения эпитаксиальных пленок $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0.03$) с высоким кристаллическим совершенством ($T_{\text{п}}=623\div 673\text{ К}$, $v_{\text{к}}=6\div 8\text{ Å/s}$, $T_{\text{Se}}=422\text{ К}$). Электронограмма пленок $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0.03$), полученных при указанных условиях, представлена на Рис.1.

Рис.1.

Электронограмма пленок $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0.03$).

Пленки Pb_{1-x}Sn_xSe на свежеотколотых гранях (111) BaF₂ растут плоскостью (111), повторяя ориентацию подложки, и кристаллизуются в гранецентрированной кубической решетке (ГЦК) с $a=6.11\text{\AA}$.

Исследование морфологии поверхности пленок проводилось на малогабаритном растровом электронном микроскопе (09ИОЭ-100-005).

Установлено, что на поверхности пленок наблюдаются черные скопления, приводящие к получению пленок с малыми значениями подвижности носителей заряда ($\mu_{77\text{K}}=(1.0\div 1.5)\cdot 10^4\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$) (Рис.2,а). С применением дополнительного компенсирующего источника паров Se в процессе роста удалось получить структурно совершенные пленки Pb_{1-x}Sn_xSe с чистой гладкой поверхностью свободной от черных скоплений (Рис.2,б), необходимым химическим составом, n-типом проводимости и высокими электрофизическими параметрами ($\mu_{77\text{K}}=(2.0\div 2.5)\cdot 10^4\text{см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$).

При температуре компенсирующего источника $T_{\text{к.ист.}}=422\text{K}$ происходит инверсия типа проводимости, и пленки приобретают p-тип проводимости.

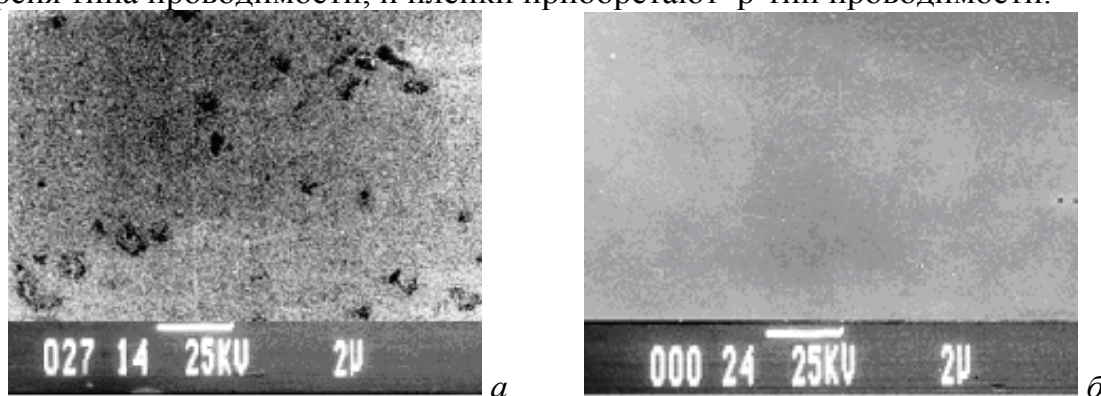


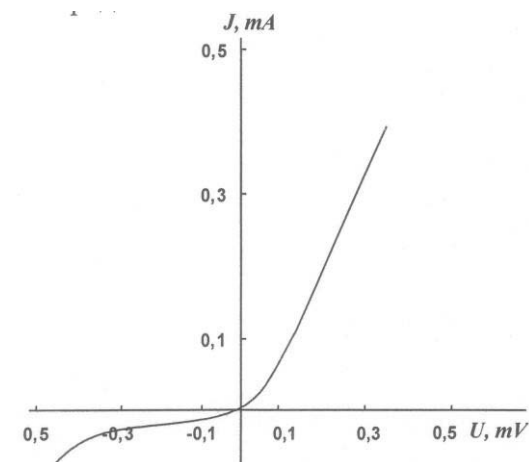
Рис.2.

Электронномикроскопические снимки поверхности эпитаксиальных пленок Pb_{1-x}Sn_xSe ($x=0.03$):
а) без дополнительного источника паров Se, б) с дополнительным источником паров Se.

Таким образом, пленки, полученные без компенсации дополнительным источником Se обладали n-типом проводимости. Компенсация этих пленок дополнительным источником паров селена во время роста приводит к образованию пленок p-типом проводимости.

На основе полученных пленок Pb_{1-x}Sn_xSe согласно разработанной технологии [8] в едином технологическом цикле, не нарушая вакуума, получены p-n гомопереходы.

Обычно создание p-n переходов затрудняется образованием различного рода поверхностных состояний, которые резко снижают параметры изготовленных на их основе приборов. Изготовление активных элементов в едином технологическом цикле уменьшает плотности поверхностных дефектов. Учитывая это обстоятельство, вышеуказанные p-n гомоструктуры были созданы в едином технологическом цикле, без нарушения вакуума, в виде пересекающихся полос. После осаждения первой системы полос n-Pb_{1-x}Sn_xSe ($x=0.03$) заслонка закрывалась и через определенное время, необходимое для установления температурного режима и перемещение маски, заслонка повторно открывалась и осаждалась вторая система полос p-Pb_{1-x}Sn_xSe ($x=0.03$). Большинство полученных по вышеприведенному методу p-n гомопереходов обладали выпрямляющим свойством. Вольт-амперная характеристика (ВАХ) одного из этих p-n гомопереходов представлена на Рис.3. При малых смещениях в прямом направлении, ВАХ описывается уравнением $J=J_0\exp(eu/\beta kT)$, где $\beta=1.5\div 2.0$, что характерно для генерационно-



Значение величины $R_0A=5\div6 \text{ Ом}\cdot\text{см}^2$ (R_0 -дифференциальное сопротивление при нулевом смещении; A -площадь p-n перехода), характеризующей данного перехода, сравнимо с соответствующей величиной для лучших диодов на основе PbSe, приведенных в литературе. Изготовленные p-n гомопереходы оказались фоточувствительными в ИК-области спектра.

Рис.3.

ВАХ p-n гомоперехода в пленках $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ ($x=0.03$).

Спектральная характеристика полученного p-n гомоперехода представлена на Рис.4, согласно которой максимальная фоточувствительность наблюдается при $\lambda=7 \text{ мкм}$.

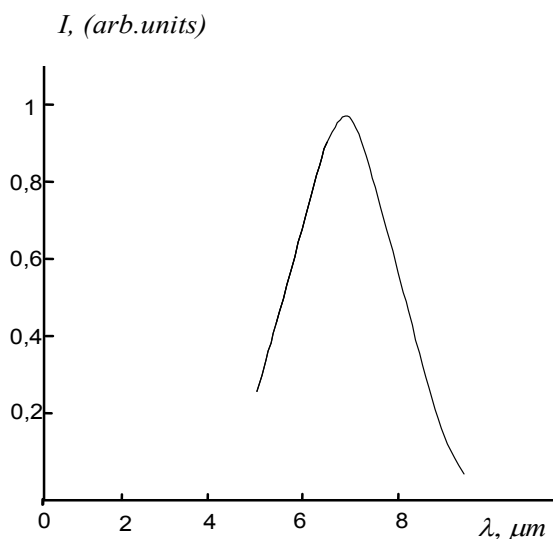


Рис.4.

Спектральная характеристика p-n гомоперехода в пленках $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ ($x=0.03$).

ВЫВОДЫ

С применением дополнительного компенсирующего источника паров селена во время роста получены структурно совершенные пленки $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ ($x=0.03$) и на их основе созданы фоточувствительные p-n гомопереходы ($\lambda_{\text{max}}=7 \text{ мкм}$).

1. Ф.Ф.Сизов, *Твердые растворы халькогенидов свинца и олова и фотоприемники на их основе*, *Зарубежная электронная техника*, **24** (1977) 50.
2. Э.Ю.Салаев, И.Р.Нуриев, Х.Д.Джалилова, Н.В.Фараджев, *Особенности роста и электрофизические свойства эпитаксиальных пленок $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}:\text{In}$* , *Прикладная Физика*, **3** (1999) 112-115.
3. И.Р.Нуриев, Н.В.Фараджев, Х.Д.Джалилова, *Фоточувствительные эпитаксиальные слои $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ легированные индием*, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XX** №5 (2000) 25-28.

4. E.Yu.Salaev, I.R.Nuriyev, Kh.D.Jalilova, N.V.Faradjev, *Optical properties of $Pb_{1-x}Sn_xSe$: In epitaxial films*, *Proceeding of SPIE*, **4340** (2000) 213-216.
5. I.R.Nuriyev, Kh.D.Jalilova, N.V.Faradjev, A.M.Nazarov, *Isoperiodic hetero-junctions based on $Pb_{1-x}Sn_xSe$, $PbSe_{1-x}S_x$ epitaxial films*, *Физика*, **7** №4 (2001) 33-35.
6. И.Р.Нуриев, Н.В.Фараджев, *Структура и морфология поверхности эпитаксиальных пленок $Pb_{1-x}Sn_xSe$* , *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXVI** №5 (2006) 43-46.
7. А.М.Афанасьев, П.А.Александров, Р.М.Имамов, *Рентгенодифракционная диагностика субмикронных слоев*, М.: Наука, (1989) 151.
8. С.А.Семилетов, Е.В.Ракова, Ф.А.Зайтов, Н.А.Сулейманов, *Получение фоточувствительных p-n переходов в пленках $PbTe$ методом конденсации в вакууме*, *Микроэлектроника*, **13** №3 (1984) 280-281.

$Pb_{1-x}Sn_xSe$ EPITAKSIAL TƏBƏQƏLƏRİNİN SƏTHİNİN MORFOLOGİYASI VƏ ONLARIN ƏSASINDA FOTOHƏSSAS p-n STRUKTURLAR

H.R.NURIYEV, A.M.NƏZƏROV, N.V.FƏRƏCOV, S.S.FƏRZƏLİYEV, R.M.SADIGOV, V.R.ƏLİYEV

Kiçik qabaritli rastr elektron mikroskopunda (09ИОЭ-100-005), BaF_2 (111) altlıqları üzərində, molekulyar dəstədən kondensasiya metodu ilə böyüdülmüş $0.5 \div 1$ мкм qalınlıqlı $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0.03$) epitaksial təbəqələrinin səthinin morfolojiyası tədqiq olunmuşdur. Böyümə prosesində, əlavə kompensəedici Se mənbəindən istifadə etməklə, təmiz səthə malik mükəmməl quruluşlu təbəqələr alınmış və onların əsasında fotohəssas p-n homokəçidlər yaradılmışdır ($\lambda_{max}=7$ мкм).

SURFACE MORPHOLOGY OF $Pb_{1-x}Sn_xSe$ EPITAXIAL FILMS AND PHOTSENSITIVE p-n STRUCTURES ON THEIR BASIS

I.R.NURIYEV, A.M.NAZAROV, N.V.FARADJEV, S.S.FARZALIYEV, R.M.SADIGOV, V.R.ALIYEVA

The surface morphology of epitaxial films $Pb_{1-x}Sn_xSe$ ($x=0.03$) with thickness $0.5 \div 1$ μm, grown up on newly splited sides of (111) BaF_2 , by the molecular beam condensation method in $10 \div 4$ Pa vacuum has been investigated on a small-sized raster electronic microscope (09ИОЭ-100-005). The structurally perfect films with a pure surface have been received by application of an additional compensating Se vapor source in the course of growth, which have been free from black congestions and on their basis photosensitive p-n homo junctions have been created. Maximum photosensitivity has been observed at $\lambda_{max}=7$ μm.

Редактор: Дж. Абдинов

УДК 621.315.592

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОБЛУЧЕННОГО ГАММА КВАНТАМИ ФОСФИДА ИНДИЯ

М.И.АЛИЕВ, Ш.Ш.РАШИДОВА, М.А.ГУСЕЙНЛИ, И.М.АЛИЕВ

*Институт Физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г.Джавида, 33
sh.sh.rashidova@gmail.com*

поступила 12.12.2011
принята к печати 12.09.2011

Ключевые слова: антиструктурный дефект, монокристалл, гамма кванты, InP

РЕФЕРАТ

Исследованы монокристаллы n-InP ($n_0=5.3 \cdot 10^{15}$) до и после облучения гамма квантами ^{60}Co с дозой 10кГр. в температурном интервале $77 \div 320\text{K}$. При облучении гамма квантами в этих кристаллах образуются антиструктурные дефекты акцепторного типа, что благоприятствует получению нелегированного полуизолирующего фосфида индия.

Исследование радиационных дефектов (РД) в соединениях InP и твердых растворах на его основе представляет значительный практический и научный интерес. Изучению этого вопроса к настоящему времени посвящено относительно небольшое число работ. В большинстве исследований отмечается высокая устойчивость этого соединения к воздействию высокоэнергетических частиц. Так, скорость удаления носителей ($-\Delta n/D$) в кристаллах InP n-типа проводимости в случае облучения их электронами при 300K примерно на порядок меньше соответствующей величины для GaAs и GaP и составляет $\sim 0.1\text{cm}^{-1}$ [1,2].

Целью настоящей работы является изучение природы дефектов, созданных под действием гамма квантов и их влияния на электрофизические свойства кристаллов InP.

Облучение кристаллов проводилась на изотопном гамма-излучателе типа МРХ-γ-25М дозой 10кГр при комнатной температуре. Образцы монокристаллов n-InP были получены методом Чохральского с исходной концентрацией $n_0=5.3 \cdot 10^{15}\text{cm}^{-3}$.

Проведены измерения электропроводности (σ), эффекта Холла (R_H) до и после облучения в температурном интервале от 80 до 320K.

По данным измерения эффекта Холла наблюдалось уменьшение концентрации носителей заряда (Рис.1) от $n_0=5.3 \cdot 10^{15}\text{cm}^{-3}$ до $n=4.6 \cdot 10^{15}\text{cm}^{-3}$ до и после облучения, соответственно.

Как ранее было показано [3], исследование точечных радиационных дефектов, вводимых облучением γ-квантами и электронами в кристаллах GaAs, характер изменения подвижности связан с дополнительным рассеянием носителей тока на ионизированных центрах, появляющихся при облучении.

В соединениях A^3B^5 , в которых разность электроотрицательностей компонентов незначительна, появляется возможность нарушения кристаллического порядка за счет образования антиструктурных дефектов (АСД) A_B и B_A . В решетке кристалла A^3B^5 дефект A_B является акцептором, B_A -донором [4].

Уменьшение концентрации носителей заряда в кристаллах InP, по-видимому, связано с образованием антиструктурных дефектов A_B (InP) [5].

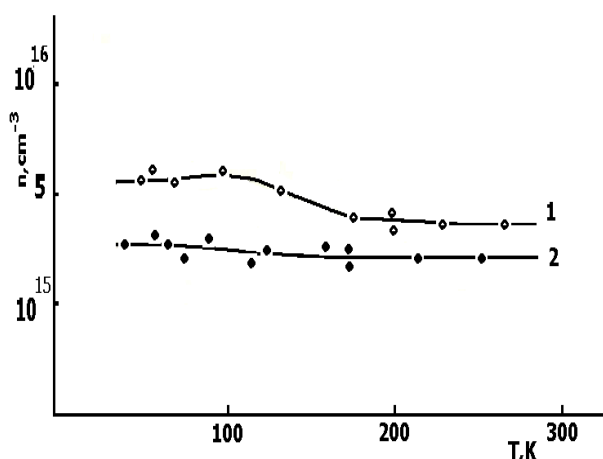


Рис. 1.

Зависимость концентрации носителей заряда от температуры до (кр1.) и после (кр2.) облучения гамма квантами в кристаллах InP.

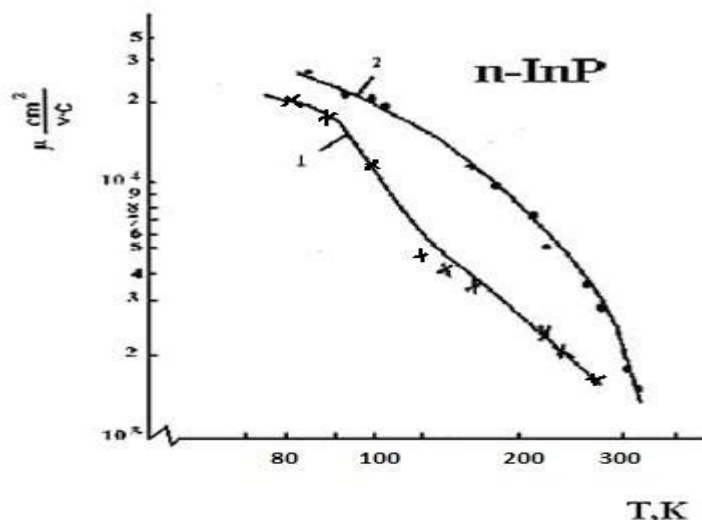


Рис. 2.

Зависимость подвижности носителей заряда от температуры до (кр1.) и после (кр2.) облучения гамма квантами ^{60}Co .

На Рис.2. представлена зависимость подвижности от температуры до и после облучения γ -квантами ^{60}Co . Как видно из рисунка, подвижность носителей заряда с увеличением температуры падает как до, так и после облучения.

При высокой температуре падение подвижности более резкое, чем при низкой температуры, что характерно для соединений A^3B^5 . Подвижность электронов во всем температурном интервале падает. Начиная с азотной температуры до 150K, падение происходит медленно, затем наблюдается резкое падение, как до, так и после облучения.

Как отмечено в работе [4] уровень дефекта P_{In}^0 , расположенный вблизи середины запрещенной зоны, может аналогично уровню EL2 в арсениде галлия способствовать получению нелегированного полуизолирующего фосфида индия.

Полученные результаты свидетельствуют о том, что при облучении гамма квантами в кристаллах InP образуются дефекты акцепторного типа, что благоприятствует получению нелегированного полуизолирующего фосфида индия.

1. Я.И.Виклюк, В.Г.Дейбук, С.В.Золотарев, *Оптические свойства неупорядоченных объемных и эпитаксиальных полупроводниковых сплавов $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$* , ФТП, **36** (2002) 925-931
2. M.I.Aliyev, M.A.Huseynova, Sh.Sh.Rashidova, I.M.Aliyev, *The Role of radiation defects on fabrication of Semiisolated materials*, TPE-06 3rd International Conference on Technical and Physical Problems in Power Engineering, Ankara, Turkey, May 29-31, (2006) 799-801, S.K.Sutradhar, D.Chattopadhyay, *Thermoelectric power of n-GaAs*, J. Phys. C. C. Solid State Phys., **12** (1979) 1693-1697.
4. P.R.Tapster, P.J.Dean, M.S.J.Shkolnik, *Deep levels introduced by electron irradiation of InP*, J.Phys.C.Sol.St.Phys., **15** (1982) P1007-1012.

5. Ш.Ш.Рашидова, *Радиационные дефекты в монокристаллах $InP<Sn>$ облученных гамма квантами ^{60}Co* , ИФЖ, 84 (2011) 442-444.

**QAMMA KVANTLARLA ŞÜALANMIŞ INDIUM FOSFID KRISTALLARININ
ELEKTROFİZİKİ XASSƏLƏRİ**

M.İ.ƏLİYEV, Ş.Ş.RƏŞİDOVA, M.A.HUSEYNLI, İ.M.ƏLİYEV

n-InP ($n_0=5.3 \cdot 10^{15}$) monokristalları, dozası 10kGr olan ^{60}Co qamma-kvantlarla şüalanmadan əvvəl və sonra 77÷320 temperatur intervalında tədqiq edilmişdir.

Müəyyən edilmişdir ki, qamma kvantlarla şüalanma nəticəsində n-InP kristallarında akseptor tipli $\dot{In}_p$ antistruktur defektləri yaranır ki, bu da legirə olunmadan yarımizoləedici indium fosfid materiallarının alınmasına imkan verir.

**ELECTROPHYSICAL PROPERTIES OF INDIUM PHOSPHIDE IRRADIATED
BY GAMMA QUANTA**

M.İ.ALIYEV, SH.SH.RASHIDOVA, M.A.QUSEYNLI, İ.M.ALIYEV

n-InP single crystals ($n_0 = 5.3 \cdot 10^{15}$) have been investigated before and after irradiation by gamma rays from ^{60}Co with the dose of 10kGr in the temperature range 77÷320K.

It has been found that the irradiation of gamma rays in crystals formed antisite defects of the acceptor type, which has been favourable to obtaining undoped semi-insulating indium phosphide.

УДК: 621.315

**TƏKDİVARLI YARIMKEÇİRİCİ NANOBORUDA
POLYARONUN EFFEKTİV KÜTLƏSİ**

O.Z.ƏLƏKBƏROV, S.M.SEYİD-RZAYEVA, S.S.HÜSEYNOVA

*Azərbaycan MEA Fizika İnstitutu
AZ 1143, Bakı, H.Cavid pr. 33
solma_ori@mail.ru*

Daxil olub: 16.05.2011
Çapa verilib: 13.06.2011

Açar sözlər: polyaron, nanoboru, effektiv kütlə, elektron-fonon qarşılıqlı təsiri

REFERAT

Təqdim olunan işdə təkdivarlı yarımkeçirici nanoboruda (NB) zəif əlaqəli optik polyaron məsələsinə baxılmışdır. Ölçüylə görə kvantlanmış səviyyələr arasındakı keçidləri nəzərə almaqla, nanoborunun radiusunun polyaronun radiusuna nisbətinin r_0/r_p ixtiyari qiymətində polyaronun effektiv kütləsi üçün ümumi ifadələr alınmışdır.

Altzonalar arasındakı keçidlərin nəzərə alınması nanoborunun radiusu artdıqca polyaronun effektiv kütləsinin artmasına səbəb olur. Aşkar edilmişdir ki, $n=0$ əsas haldan $n=(\pm 1) \div (\pm 10)$ altzonalarına keçidləri nəzərə alındıqda, $r_0/r_p > 1$ qiymətlərində polyaronun effektiv kütləsi nəzərə cəpəcə artır.

$n=1$ halından cırılmış $n=-1$ altzonsına keçidin nəzərə alınması isə $n=0$ halı ilə müqayisədə, polyaronun effektiv kütləsinin artmasına səbəb olur.

CİRİŞ

Aşağıölçülü sistemlər fizikasında ən aktual tədqiq obyektlərindən biri nanoborulardır (NB). Hal-hazırda yarımkeçirici NB-nun hazırlanmasına və tədqiqinə çox diqqət verilir. GaS-dən hazırlanmış çoxdivarlı nanoborular üçün sadə metod işlənmişdir [1]. GaS-dən hazırlanmış nanoboruların diametri 30-150 nm və uzunluğu 10 mkm ölçülərinə malikdir [2]. InGaAs/GaAs təkdivarlı nanoboruların hazırlanması texnikası [3] işində təsvir edilmişdir.

İkiqat layların özünü döndərmək üsulu ilə alınan NB-in [3, 4] radius və divarlarının qalınlığı kimi parametrlərin qiymətinə nəzarət etmək mümkündür və onların ölçülərini geniş miqyasda [5,6] dəyişmək olur. Məsələn, diametri 50-200 nm və uzunluğu 130-500 nm həddində dəyişən nanoboruların alınmasının mümkünlüyü [3] işində qeyd olunur. Özünəməxsus fiziki xassələrinə görə qeyri-üzvi fullerenəbənzər NB-lar, laylı metallik xalkoqenidlərdən, A^3B^5 və Ge, Si yarımkeçiricilərindən düzəldilmiş NB-lar [1] müasir bərk cisim cihazlarında geniş tətbiq olunur.

90-cı illərdən başlayaraq aşağıölçülü sistemlər fizikasında NB-ların elektron xassələri intensiv olaraq araşdırılır. Elektron-fonon qarşılıqlı təsiri və ya polyaron effektləri NB-ların elektron dəyişdirə bilirlər.

Məlumdur ki, ölçüylə məhdudlaşan strukturlarda polyaron effektlərinin qiyməti həcmi nümunələrdəkindən [7] heç də az deyil. Həyəcənlaşma nəzəriyyəsiindən istifadə etməklə, ədəbiyyatda təkdivarlı yarımkeçirici NB-da zəif əlaqəli polyaron məsələsinə baxılmışdır [8]. Bu işdə yalnız ölçüylə kvantlanmış ən aşağıda yerləşən zonadaxili keçidləri nəzərə almaqla, polyaronun əlaqə enerjisinin analitik ifadəsi həcmi fonon yaxınlaşmasında alınmışdır.

Polyaronun ən əsas xarakterik parametrlərindən biri onun effektiv kütləsidir. Polyaronun effektiv kütləsi ölçülən kəmiyyətdir. Maqnitofonon və siklotron rezonansı

eksperimentləri polyaronun effektiv kütləsini təyin etməyə imkan verir. Qeyd edək ki, maqnitofonon rezonansı üçün siklotron tezliyi optik fononların tezliyinə uyğundur.

Silindrin r_0 radiusunun ixtiyari qiymətində polyaronun effektiv kütləsinin ümumi şəkildə analitik ifadəsini almaq üçün altzonalar arasındakı keçidləri nəzərə almaq lazımdır. Təqdim olunan işində əsas məqsədi təkdivarlı yarımkeçirici NB-da altzonalar arasındakı keçidləri nəzərə almaqla polyaronun effektiv kütləsinin hesablanmasıdır.

OPTİK POLYARONUN MƏXSUSI ENERJISI

Polyaronun effektiv kütləsinin analitik ifadəsini almaq üçün elektronun uzununa optik LO-fononlarla qarşılıqlı təsirinin enerjiyə əlavəsini hesablamaq lazımdır. Nəzərdə tutulan məsələni həll etmək üçün r_0 radiuslu ikiölçülü silindrik səthdə yerləşmiş elektron qazından istifadə edilmişdir. Fərz olunur ki, elektron qazındakı elektronlar bir-biri ilə qarşılıqlı təsirdə deyil. Kvantlanmış enerji spektri və elektronun normallaşmış dalğa funksiyasını [8] aşağıdakı şəkildə verək:

$$\varepsilon_{nk} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 n^2}{2mr_0^2}, \quad (1)$$

$$\psi_{nk}(z, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi L}} e^{i(kz + n\varphi)}, \quad (2)$$

burada m - elektronun effektiv kütləsi, r_0 - silindrin radiusu, φ və z - silindrik koordinatlar, L - silindrin hündürlüyü, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ölçülə kvantlanmış altzonalarının sıra saylarıdır. $\hbar \vec{k}$ kvazi impulsu elektronun silindrin səthində z oxu boyunca hərəkətinə uyğundur. Həcmi LO-fononlarına kontinual yaxınlaşmada baxacağıq. Fərz edək ki, NB polyar həcmi kristalın içinə daxil edilmişdir.

Analoji həndəsi formaya malik ölçülə məhdudlaşan strukturun oxşar təsvirinə [9] işində təsadüf olunur. Orada nazik lay şəklində olan mikrotubulun suyun içərisində rəqsi hərəkətləri modelləşdirilmişdi.

Adətən həcmi polyar kristalda LO-fononları ilə qarşılıqlı təsir nəticəsində elektronun enerjisi azalır. Belə qarşılıqlı təsirin nanoborunun səthindəki elektronun enerjisində təsirini müəyyən edək. Bu məqsədlə LO-fononları ilə qarşılıqlı təsirin hesabına elektronun enerjisinin $\Delta E_{n,k}$ dəyişməsinə müəyyən edək. Hesablamalar standart həyəcanlaşma nəzəriyyəsi [10] çərçivəsində aparılır. Zəif əlaqə halında, həyəcanlaşma nəzəriyyəsinin ikinci tərtib yaxınlaşmasında elektronun enerjisində əlavə aşağıdakı şəkildə ifadə olunur:

$$\Delta E_{n,k} = \sum_{n', \vec{q}} \frac{|M_{n-n', \vec{q}}|^2}{\varepsilon_{nk} - \varepsilon_{n'k-\vec{q}} - \hbar\omega_L}, \quad (3)$$

Burada $q_\perp$, q_z fononların dalğa vektorunun $\vec{q}(q_\perp, q_z)$ eninə və uzununa proyeksiyalarıdır, ω_L - LO-fononlarının sərhəd tezliyidir. $(-e \sum_{\vec{q}} \Phi_{\vec{q}})$ həyəcanlaşma

enerjisinin matrisa elementi $M_{n-n', \vec{q}}$ elektron-fonon qarşılıqlı təsirinə uyğundur. Silindrik koordinatlarda yazılmış skalyar potensial [8] üçün ifadəni nəzərə alaraq

$$\Phi_{\vec{q}} = i \sqrt{\frac{2\pi\hbar\omega_L}{\epsilon^* V}} \frac{1}{\sqrt{q_\perp^2 + q_z^2}} e^{-i(q_\perp r_0 \cos\varphi + q_z z)}, \quad (4)$$

(2) dalğa funksiyasından istifadə etməklə φ və z -ə görə integrallamadan sonra, $M_{n-n',\bar{q}}$ matris elementi üçün aşağıdakı ifadəni alırıq

$$M_{n-n',\bar{q}} = -\hbar\omega_L \sqrt{\frac{4\pi\alpha r_p}{V}} \frac{i^{(n-n'+1)}}{\sqrt{q_\perp^2 + q_z^2}} J_{n-n'}(q_\perp r_0). \quad (5)$$

(4) ifadəsindəki $(\epsilon^*)^{-1} = \epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1}$ polaron nəzəriyyəsində istifadə olunan effektiv dielektrik nüfuzluğudur, ϵ_0 və ϵ_∞ statik və yüksək tezlikli dielektrik sabitləridir. (5)-ə daxil olan α əlaqə parametri, polaronun radiusu r_p aşağıdakı ifadələrlə təyin olunur

$$\alpha = \sqrt{\frac{m}{2\hbar\omega_L}} \frac{e^2}{\hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right), \quad r_p = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_L}},$$

$J_{n-n'}(q_\perp r_0)$ - $(n-n')$ indeksli Bessel funksiyasıdır.

(5) ifadəsini aldıqda nəzərdə tutulmuşdur ki, kifayət qədər aşağı temperaturlarda, elektronların LO-fononları ilə qarşılıqlı təsiri yalnız optik fononun şüalanması ilə nəticələnən virtual keçidlərə gətirir. (3) ifadəsində (1) və (5) münasibətlərindən istifadə edib, elektronun enerjisinə əlavə üçün alırıq:

$$\Delta E_{n,k} = \frac{4\pi\alpha}{V} (\hbar\omega_L)^2 r_p \sum_{n',\bar{q}} \frac{|J_{n-n'}(q_\perp r_0)|^2}{(q_\perp^2 + q_z^2)(\epsilon_{nk} - \epsilon_{n'k-q_z} - \hbar\omega_L)}. \quad (6)$$

Sadəlik üçün yeni, adsız dəyişənləri daxil edək $x = r_p q_\perp$, $z = r_p q_z$, $\kappa = r_p k$.

Silindrik $q_\perp$, q_z , φ koordinatlarında cəmləmədən integrallamaya keçək. φ bucağına görə integrallamanı apardıqdan sonra, polaronun $\Delta E_{n,k} \leftrightarrow \Delta E_{n,\kappa}$ əlaqə enerjisi üçün x , z , κ dəyişənlərində aşağıdakı ifadəni alırıq

$$\Delta E_{n,\kappa} = -\frac{\alpha\hbar\omega_L}{\pi} \sum_{n'} \int_0^\infty \int_{-\infty}^\infty \frac{\left| J_{n-n'}\left(x \frac{r_0}{r_p}\right) \right|^2}{\left(z^2 - 2\kappa z + \left(\frac{r_p}{r_0}\right)^2 (n'^2 - n^2) + 1 \right)} \frac{1}{(x^2 + z^2)} x dx dz \quad (7)$$

(7)-də integralaltı ifadəni sıraya ayırdıqda, k -ya görə ikinci tərtib hədlərlə kifayətlənərək $\Delta E_{n,k}$ üçün aşağıdakı ifadəni alırıq:

$$\Delta E_{n,k} = \Delta E_{n,0} + A_n \kappa^2. \quad (8)$$

İntegralaltı ifadədə κ ilə mütənəsb olan hədd sıraya ayırma zamanı z -ə görə tək funksiya olduğundan, həmin həddin integralı sıfıra bərabər olur. Son nəticədə $\Delta E_{n,0}$, A_n üçün aşağıdakı ifadələri alırıq

$$\Delta E_{n,0} = -\frac{2\alpha\hbar\omega_L}{\pi} \sum_{n'} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\left| J_{n-n'}\left(x \frac{r_0}{r_p}\right) \right|^2}{\left(z^2 + \left(\frac{r_p}{r_0}\right)^2 (n'^2 - n^2) + 1 \right)} \frac{1}{(x^2 + z^2)} x dx dz, \quad (9)$$

$$A_n = -\frac{8\alpha\hbar\omega_L}{\pi} \sum_{n'} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\left| J_{n-n'} \left(x \frac{r_0}{r_p} \right) \right|^2}{\left(z^2 + \left(\frac{r_p}{r_0} \right)^2 (n'^2 - n^2) + 1 \right)^3} \frac{z^2}{(x^2 + z^2)} x dx dz. \quad (10)$$

(9) və (10)-da x dəyişəninə görə integrallamanın nəticəsi aşağıdakı ifadəni verir

$$\int_0^\infty \frac{1}{(x^2 + z^2)} \left| J_{n-n'} \left(x \frac{r_0}{r_p} \right) \right|^2 x dx = I_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} \right) K_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} \right), \quad (11)$$

burada $I_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} \right)$, $K_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} \right)$ uyğun olaraq birinci və ikinci tərtib Bessel funksiyalarıdır.

Beləliklə, (11) ifadəsini nəzərə alaraq x -a görə integrallamanın nəticəsində (9) və (10) üçün aşağıdakı ifadələri alırıq:

$$\Delta E_{n,0} = -\frac{2\alpha\hbar\omega_L}{\pi} \sum_{n'} \int_0^\infty I_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} \right) K_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} \right) \left/ \left(z^2 - \left(\frac{r_p}{r_0} \right)^2 (n^2 - n'^2) + 1 \right) \right. dz, \quad (12)$$

$$A_n = -\frac{8\alpha\hbar\omega_L}{\pi} \sum_{n'} \int_0^\infty z^2 I_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} \right) K_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} \right) \left/ \left(z^2 - \left(\frac{r_p}{r_0} \right)^2 (n^2 - n'^2) + 1 \right) \right. dz. \quad (13)$$

Daha sonra, sadəlik üçün $b_{nn'} = \sqrt{1 - \left(\frac{r_p}{r_0} \right)^2 (n^2 - n'^2)}$ işarələməsini qəbul edib,

yeni $z \rightarrow zb_{nn'}$ dəyişəninə keçdikdən sonra (12) n (13) integralları üçün alırıq

$$\Delta E_{n,0} = -\frac{2\alpha\hbar\omega_L}{\pi} \sum_{n'} \frac{1}{b_{nn'}} \int_0^\infty \frac{I_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} b_{nn'} \right) K_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} b_{nn'} \right)}{(z^2 + 1)} dz, \quad (14)$$

$$A_n = -\frac{8\alpha\hbar\omega_L}{\pi} \sum_{n'} \frac{1}{b_{nn'}^3} \int_0^\infty \frac{I_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} b_{nn'} \right) K_{n-n'} \left(z \frac{r_0}{r_p} b_{nn'} \right)}{(z^2 + 1)^3} z^2 dz. \quad (15)$$

Son iki integral G_1, G_2 Meyer funksiyaları vasitəsilə ifadə olunur:

$$\Delta E_{n,0} = -\frac{\alpha\hbar\omega_L}{2\pi^{3/2}} \sum_{n'} \frac{1}{b_{nn'}} G_1, \quad (16)$$

$$A_n = -\frac{\alpha\hbar\omega_L}{\pi^{3/2}} \sum_{n'} \frac{1}{b_{nn'}^3} G_2. \quad (17)$$

G_1, G_2 Meyer funksiyaları aşağıdakı ifadələr vasitəsilə müəyyən olunur [11]

$$G_1 = G_{2,4}^{3,2} \left(\left(\left(\frac{r_0}{r_p} \right)^2 + n'^2 - n^2 \right) \left| \begin{array}{c} \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\ 0, \frac{1}{2}, |n-n'|, -|n-n'| \end{array} \right. \right),$$

$$G_2 = G_{2,4}^{3,2} \left(\left(\left(\frac{r_0}{r_p} \right)^2 + n'^2 - n^2 \right) \left| \begin{array}{c} -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \\ 0, \frac{1}{2}, |n-n'|, -|n-n'| \end{array} \right. \right).$$

İndi (8) münasibətinin ikinci həddindən istifadə edib, polyaronun kütləsi üçün analitik ifadəni müəyyən edək. Belə ki, elektronun kütləsinə olan əlavəni tapmaq üçün (8) ifadəsində κ^2 ilə mütənəsb həddə aşağıda göstərilən şəkildə çevirmə aparaq:

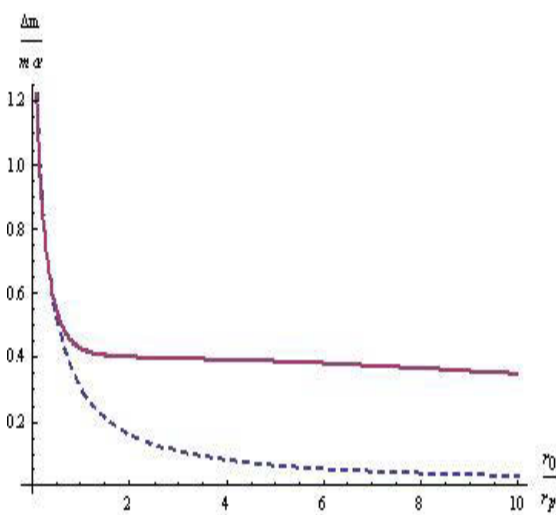
$$A_n \kappa^2 = A_n r_p^2 k^2 = \frac{A_n}{\hbar \omega_L} \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \frac{1}{m_p} = \frac{1}{m} \left(1 + \frac{A_n}{\hbar \omega_L} \right). \quad (18)$$

$A_n/\hbar \omega_L$ vuruğu vahiddən kiçik olduğuna görə sonuncu münasibətdən alırıq:

$$\frac{\Delta m}{m} = -\frac{A_n}{\hbar \omega_L}, \quad \text{burada} \quad \Delta m = m_p - m. \quad (19)$$

(19) ifadəsində $r_0 \rightarrow 0$ keçid halında $\Delta m/\alpha m$ -in birölçülü sistem üçün doğru olan nəticəsini almaq olur. r_0/r_p nisbətinin artması ilə $\Delta m/\alpha m$ -in ədədi qiyməti ikiölçülü sistem üçün məlum olan $\pi/8$ qiymətinə yaxınlaşır.

ƏDƏDİ HESABLAMALAR



Polyaronun kütləsi ilə bağlı ədədi hesablamaları apararaq baxdığımız model üçün alınan nəticələri təhlil edək. Şəkil 1 və 2-də $\Delta m/\alpha m$ -in r_0/r_p nisbətindən asılılıq qrafiki verilmişdir.

Şəkil 1.

$n=0$ halında olan polyaron üçün $\Delta m/\alpha m$ -in r_0/r_p nisbətindən asılılıqları: a) qırıq xətlə əyriləri – altzonalarası keçidlər nəzərə alınmadığını göstərir; b) bütöv xətlə olan əyriləri – $n=(\pm 1) \div (\pm 10)$ nömrəli altzonalara keçidlərin nəzərə alındığını göstərir.

Şəkil 2.

Həyəcanlanmış $n=1$ halında olan polyaron üçün $\Delta m/\alpha m$ -in r_0/r_p nisbətindən asılılıqları: a) qırıq xətlə əyriləri altzonalarası keçidlərin nəzərə alınmadığını göstərir; b) bütöv xətlə əyriləri $n=1$ altzonasından $n=(\pm 1) \div (\pm 10)$ nömrəli altzonalara keçidlərin nəzərə alındığını göstərir.

Şəkil 1-dən müşahidə etmək olar ki, $r_0/r_p < 1$ şərti daxilində altzonalarası keçidlərin polyaronun kütləsinə olan əlavəsi cüzdür. Baxılan halda polyaronun kütləsinə olan əlavə $r_0/r_p > 1$ şərti daxilində əhəmiyyətli dərəcədədir və NB-nun radiusu artdıqca bu əlavə də artır. Belə mənzərə onunla əlaqədardır ki, NB-nun radiusu artdıqca altzonalalar arası məsafə azalır və altzonalalar arası keçidlərin hesabına polyaronun kütləsinə olan əlavə də artır. Buna görə də r_0 qiymətinin artması ilə daha çox altzonalarası keçidləri nəzərə almaq lazım gəlir.

Şəkil 2-dən görünür ki, altzonalalar arası keçidlərin hesabına polyaronun kütləsinə olan əlavə cüzdür. Qeyd edək ki, cırılmış $n=1$ halından cırılmış $n=-1$ halına

keçidin nəzərə alınması isə $n = 0$ halındakı polyaronla müqayisədə, polaronun effektiv kütləsinin artmasına səbəb olur.

İndi GaAs üçün r_p -nin ədədi qiymətini hesablayaq. GaAs üçün elektronun effektiv kütləsi $m = 0.067 m_0$, burada m_0 -sərbəst elektronun kütləsidir, LO- fononu üçün $\hbar\omega_L = 421 \text{ K} = 35.3 \text{ mƏB}$ olduğunu nəzərə alaraq polaronun radiusu üçün $r_p = 4 \text{ nm}$ qiymətini alırıq. Burada alınan nəticələr $r_0 > a$ şərti daxilində doğrudur. GaAs üçün qəfəs sabitinin $a = 0.57 \text{ nm}$ olduğunu nəzərə alaraq $r_0/r_p \approx 0.14$ sərhəd qiymətini alırıq.

Prinsin həmmüəlliflərlə olan işində GaAs NB-sunun diametri 50 nm-dən 200 nm-ə qədər dəyişir [4]. Belə olan halda r_0/r_p nisbəti 6.25-dən 25-ə kimi qiymətləri ala bilər.

Müəlliflər prof. F.M.Haşımzadəyə işin müxtəlif icra mərhələlərində aparılan müzakirələrdə dəfələrlə iştirakına görə öz təşəkkürlərini bildirirlər.

1. Ujjal K.Gautam, S.R.C.Vivechand, A.Govindaraj, G.U.Kulkami, N.R.Selvi, and C.N.R.Rao, *Generation of Onions and Nanotubes of GaS and GaSe through Laser and Thermally Induced Exfoliation*, *J.Am. Chem. Soc.*, **127** (2005) 3658-3659.
2. P.A.Hu, Y.Q.Lu, L.Fu, L.C.Cao, D.B.Zhu, *GaS multi-walled nanotubes from the lamellar precursor*, *Appl. Phys. A*, **80** (2005) 1413-1417.
3. V.Ya.Prinz, V.A.Seleznev, A.K.Gutakovsky, A.V.Chekhovskiy, V.V.Preobrazhenskii, M.A.Putyato, T.A.Gavrilova, *Free-standing and overgrown InGaAs/GaAs nanotubes, nanohelices and their arrays*, *Physica E*, **6** (2000) 828-831.
4. V.Ya.Prinz, A.V.Chekhovskiy, V.V.Preobrazhenskii, B.R.Semyagin, A.K.Gutakovsky, *A technique for fabricating InGaAs/GaAs nanotubes of precisely controlled lengths*, *Nanotechnology*, **13** (2002) 231-233.
5. V.Ya.Prinz, V.A.Seleznev and A.K.Gutakovsky, *Self-Formed InGaAs/GaAs nanotubes: Concept, Fabrication, Properties*, in *Proc.24-th Inter. Conf. on the Phys. of Semiconductors*, Ed.: World Scientific, Singapore, *The Physics of Semiconductors* (1999).
6. V.Ya.Prinz, *A new concept in fabricating building blocks for nanoelectronic and nanomechanic Devices*, *Microelectronic Engineering.*, **69** (2003) 466-475.
7. В.П.Драгунов, И.Г.Неизвестный, В.А.Гриджин, *Основы наноэлектроники*, Москва, Логос, (2006) 293.
8. N.M.Guseinov, O.Z.Alekperov, S.S.Guseinova, *Polaron in the Single-walled Polar Nanotube*, *Modern Physics Letters B*, **20** (2006) 1771-1776.
9. Y.M.Sirenko, M.A.Stroscio, K.W.Kim, *Vibrations of Microtubules in a fluid*, *Phys. Rev. E.*, **53** (1996) 1003-1011.
10. Поляроны, Сборник, под редакцией Ю.А.Фирсова.. Изд. Наука (1975) 423.
11. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик, *Таблицы интегралов и сумм, рядов и произведений*, Наука, Москва, (1971) 1108.

EFFECTIVE POLARON MASS IN SINGLE-WALLED SEMICONDUCTING NANOTUBES

O.Z.ALEKPEROV, S.M.SEYID-RZAYEVA, S.S.HUSEYNOVA

The problem of the weak-coupling optical polaron in single-walled semiconducting nanotube (NT) have been considered. The general expression for the effective polaron mass with an arbitrary value of the ratio of NT radius to the polaron radius r_0/r_p have been obtained, taking into account of inter-level dimensional quantization transitions.

On the basis carried out calculations has been established that the contribution to the polaron mass caused by transitions from the ground state with number $n=0$ to the subbands $n=(\pm 1) \div (\pm 10)$ has been significantly for the values $r_0/r_p > 1$.

For the values $r_0/r_p < 1$ contribution to the polaron mass from the inter-level transitions has been negligible.

The presence of transitions between the degenerated subbands with the number $n=1$ to subbands with the number $n=(\pm 1) \div (\pm 10)$ has led an increase to the polaron mass compared with the polaron in the state $n=0$.

ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ПОЛЯРОНА В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ ОДНОСТЕННОЙ НАНОТРУБКЕ

О.З.АЛЕКПЕРОВ, С.М.СЕИД-РЗАЕВА, С.С.ГУСЕЙНОВА

Рассмотрена задача об оптическом поляроне слабой связи в одностенной полупроводниковой нанотрубке (НТ). Получены общие выражения для эффективной массы полярона с учетом межуровневых переходов размерного квантования при произвольном значении отношения радиуса НТ к радиусу полярона r_0/r_p .

Установлено, что с увеличением радиуса НТ поправка к значению массе полярона от межуровневых переходов увеличивается. На основе проведенных вычислений установлено, что вклад к массе полярона с учетом переходов от основного состояния с номером $n=0$ к подзонам $n=(\pm 1) \div (\pm 10)$ для значений $r_0/r_p > 1$ значителен. Для значений $r_0/r_p < 1$ вклад к массе полярона от межуровневых переходов незначителен. Наличие переходов между вырожденными подзонами с номером $n=1$ приводит к увеличению поправки к массе полярона по сравнению с поляроном в состоянии $n=0$.

Редактор: Г.Оруджев

УДК 548.74; 539.234

КИНЕТИКА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ НАНОТОЛЩИННЫХ АМОРФНЫХ ПЛЕНОК AgGaSe_2

А.Ч.МАМЕДОВА, Д.И.ИСМАИЛОВ

*Институт физики НАНАук Азербайджана
AZ-1143, Баку, пр. Г. Джавида, 33
amamedova@inbox.ru*

поступила 14.03.2011
принята к печати 23.05.2011

РЕФЕРАТ

Методом кинематической электронографии исследована кинетика фазовых превращений, происходящих в результате кристаллизации аморфных пленок AgGaSe_2 . Установлено, что кристаллизация тонких аморфных слоев AgGaSe_2 , полученных вакуумным осаждением на монокристаллы NaCl, KCl происходит по закономерностям, установленным Аврами–Колмогоровым, и описывается аналитическим выражением $V_t = V_0[1 - \exp(-kt^m)]$. Определены мерность роста при кристаллизации аморфных пленок AgGaSe_2 , равная трехмерной, а также значения энергий активаций зародышеобразования и дальнейшего их роста, равные $E_s = 17,5 \text{ ккал/моль}$ и $E_p = 12,7 \text{ ккал/моль}$, соответственно.

Ключевые слова: кинетика кристаллизации, фазовое превращение, аморфная пленка, нанотолщины

Изучение кинетики процессов кристаллизации тонких аморфных полупроводниковых пленок, представляющих собой процесс фазового превращения, включающего в себя образование зародышей и их дальнейший рост, имеет большое значение в полупроводниковом материаловедении. Для изготовления нанотолщинных полупроводниковых материалов с заданными свойствами необходимы знания о механизме роста, мерности и зависимости скорости кристаллизации от температуры, т.е. температурно–временной зависимости кристаллизации тонких аморфных пленок.

Данная работа посвящена исследованию кинетики фазовых превращений, происходящих в результате кристаллизации аморфных пленок состава AgGaSe_2 , полученных как в обычных условиях – в условиях отсутствия каких-либо внешних воздействий, так и в условиях воздействия на молекулярный пучок электрического поля напряженностью 3000 В/см.

Объекты исследования – аморфные пленки AgGaSe_2 , получали путем конденсации синтезированных соединений в вакууме 10^{-4} Па. В качестве подложек служили небольшие свежие сколы NaCl. Пленки с этих подложек снимались растворением каменной соли в дистиллированной воде и подхватывались на специальные печки, предназначенные для съемок кинематических электронограмм. Для определения кинетических параметров кристаллизации AgGaSe_2 были получены кинематические электронограммы при трех температурах 393, 403, 413 К соответственно.

На кинематической электронограмме (Рис.1), полученной при температуре 413 К от аморфной пленки AgGaSe_2 толщиной 30 нм, наблюдаются: аморфная фаза, сосуществование аморфной и кристаллической фаз и линии полностью закристаллизованного AgGaSe_2 . Аморфные пленки AgGaSe_2 кристаллизуются в тетрагональной решетке с постоянными элементарных ячеек $a = 0,597$; $c = 1,08 \text{ нм}$, $c/a = 0,182 \text{ нм}$. Кристаллическая структура описывается пространственной группой симметрии $I\bar{4}2d(D_{2d}^{12})$ [1].

Исчезновение диффузных максимумов аморфной фазы AgGaSe₂ сопровождается возникновением линий кристаллической фазы. Интенсивности линий кристаллического AgGaSe₂ соответствуют различным моментам термической обработки пленок. От интенсивности дифракционных линий к количеству закристаллизовавшегося вещества переходили с помощью формулы, приведенной в [2]

$$I_{hkl} = I_0 \lambda \left| \frac{\Phi_{hkl}}{\Omega} \right|^2 V \frac{d_{hkl}^2 \Delta P}{4\pi L \lambda}, \quad (1)$$

где I_0 – интенсивность первичного пучка, λ – длина волны электронного пучка, Φ – структурный фактор, Ω – объем элементарной ячейки, V – облучаемый объем поликристаллического вещества, d_{hkl} – межплоскостное расстояние, Δ – малый участок Дебаевского кольца, P – фактор повторяемости, $L\lambda$ – постоянная прибора.

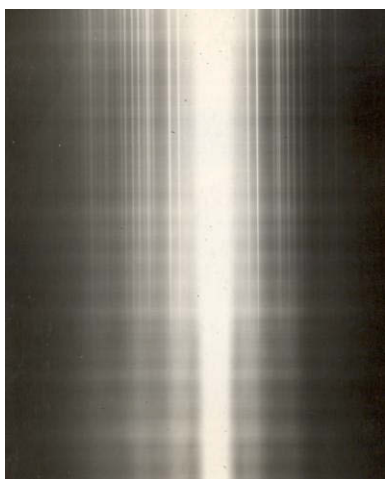


Рис. 1.

Кинематическая электронограмма от AgGaSe₂.

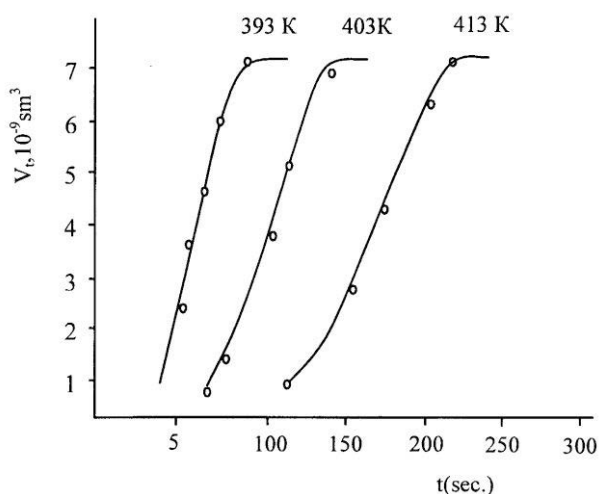


Рис. 2.

Кинетические кривые кристаллизации AgGaSe₂.

Во время кинематической съемки значения величин в (1), кроме объема V , остаются постоянными. Следовательно, определив изменение интенсивности линий на кинематических электронограммах, можно найти изменение количества вещества во время кристаллизации. Поскольку интенсивность линий (I_{hkl}) пропорциональна рассеивающему объему V , переход от интенсивности к объему осуществляется следующим образом. Максимальное значение интенсивности сопоставляется с облучаемым объемом $V = S \cdot h$, здесь S – сечение электронного пучка $\sim 2,8 \cdot 10^{-3} \text{ см}^2$, h – толщина пленки $\sim 2,5 \cdot 10^{-6} \text{ см}$.

Определив таким образом объем, приходящийся на единицу интенсивности, можно найти значение объема закристаллизовавшейся фазы в каждый момент времени. На основе этого были построены графики зависимости объема фазы, претерпевшей изменение от времени (Рис.2). Полученные изотермы сравнивались с аналитическим выражением для кинетических кривых фазовых превращений [3]

$$V_t = V_0 [1 - \exp(-kt^m)], \quad (2)$$

здесь V_t – закристаллизовавшийся объем в момент времени t , V_0 – начальный объем, k – постоянная скорости реакции, m – константа, характеризующая мерность роста центра новой фазы.

Из (2) следует линейная зависимость $\ln \ln \frac{V_0}{V_0 - V_t}$ от $\ln t$. На основе экспериментальных данных построенный график указанной зависимости показывает, что она описывается прямыми линиями для всех вышеприведенных температур.

Из наклона прямых вычислялось значение показателя степени “m” при времени t, для которого получались значения близкие к четырем. Это показывало, что при кристаллизации аморфных пленок AgGaSe₂ происходит трехмерный рост кристалликов, что описывается уравнением (2).

По значениям lnk, найденным для температур, указанных выше были построены график зависимости lnk от обратной температуры для AgGaSe₂. Поскольку оказалось, что эти зависимости имеют линейный характер, то скорости зародышеобразования и дальнейшего их роста в этом случае можно выразить уравнениями Аррениуса

$$\left. \begin{aligned} g_z &= c_1 \cdot e^{-E_z/RT} \\ g_p &= c_2 \cdot e^{-E_p/RT} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Из наклона прямых зависимостей lnk(1/T) для AgGaSe₂ оценено значение общей энергии активации кристаллизации (U_{общ.}), равное 55,7ккал/моль.

Для определения энергии активации зародышеобразования E_з, нами для AgGaS₂(Se₂) были построены графики зависимости ln1/τ(1/T), где τ – инкубационный период, т.е. экспериментально наблюдаемое время начала кристаллизации. Для аморфных пленок AgGaSe₂ E_з оказалось равно 17,5ккал/моль. Энергии активации роста кристалликов (E_р), определены из соотношения E_р=(U_{общ.}-E_з)/3 и равно 12,7ккал/моль для AgGaSe₂.

Постоянные и переменные электрические поля оказывают существенное влияние на процессы кристаллизации. Согласно [4] наиболее ценными из них являются методы, позволяющие регулировать стадию образования зародышей конденсируемой фазы. Наряду с другими методами в этом направлении успешно используются методы воздействия внешним электрическим полем.

Для аморфных пленок AgGaSe₂, конденсированных в условиях воздействия внешнего электрического поля, значения общей энергии активации зародышеобразования и роста также как и в случае AgGaS₂ [5], оказались несколько заниженными, чем соответствующие значения для пленок полученных вне поля (Таблица 1). Наблюдаемый нами эффект электрического поля, который приводит к ускорению процесса кристаллизации и вызывает уменьшение значений активационных энергий объясняется тем, что происходит взаимодействие поля с заряженными точечными дефектами или их скоплениями в пленках.

Таблица 1.

Кинетические параметры кристаллизации аморфных пленок AgGaS₂(Se₂).

Соединения (аморфные)	Напряженность электрического поля E, (в·см ⁻¹)	m	Энергия активации кристаллизации		
			U _{общ.} (ккал/моль)	E _з (ккал/моль)	E _р (ккал/моль)
AgGaS ₂	E=0	4	62,2	21,5	13,6
	E=3000	4	53,3	17,2	12,0
AgGaSe ₂	E=0	4	55,7	17,5	12,7
	E=3000	4	48,3	13,5	11,6

Таким образом, нами установлено, что кинетика фазовых превращений, протекающих в аморфных пленках AgGaSe₂, полученных в обычных и в условиях воздействия электрического поля напряженностью 3000/см описывается аналитическим уравнением (2) и подчиняется закономерностям, установленным Аврами и Колмогоровым.

1. А.Ч.Мамедова, *Образование наноразмерных аморфных и кристаллических фаз в системах Ag–Ga–S(Se), фазовые превращения в тонких пленках*

- AgGaS₂(Se₂)*, дисс. на соискание степени докт. философии по физике Баку, (2010) 151.
2. Б.К.Вайнштейн, *Структурная электронография М.: АН СССР*, (1956) 315.
 3. Д.И.Исмаилов, *Фазообразование, структура и кинетика кристаллизации в тонких пленках A³-B-C₂⁶, эпитаксиальный рост сверхструктурных фаз. Дисс. на соискание степени докт. физ.-мат. наук. Баку, (2007) 346.*
 4. D.I.Ismailov, E.Sh.Alekberov, M.F.Aliyeva, *Formation of Superlattices Under Phase Transformations in TlGaSe₂, Surface Investigation*, **15** (2000) 1897 – 1901
 5. Д.И. Исмаилов, А.Ч.Мамедова, *Фазовые равновесия в тонких пленках системы Ag-Ga-S, кинетические параметры кристаллизации AgGaS₂, Неорганические материалы*, **44** (2008) 911-914.

AgGaSe₂ NANOQALINLIQLI AMORF TƏBƏQƏSİNİN KRISTALLAŞMA KİNETİKASI

A.Ç.MƏMMƏDOVA, C.İ.İSMAYILOV

Kinematik elektronografiya üsulunun tədqiqi ilə AgGaSe₂ amorf təbəqələrinin kristallaşması nəticəsində baş verən faza çevrilmələri tədqiq edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, NaCl, KCl monokristalları üzərində vakuumda çökdürmə ilə alınmış AgGaSe₂ nazik amorf təbəqələrin kristallaşması Avrami-Kolmogorov qanunauyğunluqları əsasında baş verərək $V_t = V_0[1 - \exp(-kt^m)]$ analitik tənliyi ilə təsvir olunur. AgGaSe₂ amorf təbəqələrinin kristallaşması zamanı əmələ gələn kristallitlərin üçölçülü ($m=4$) olması təyin edilmiş, kristallit rüseymlərin əmələgəlməsi və onların sonrakı böyümələri üçün tələb edilən aktivləşmə enerjilərinin (E_r və E_b) qiymətləri müəyyən olunmuşdur: $E_z=17,5\text{ kkal/mol}$; $E_b=27,6\text{ kkal/mol}$.

CRYSTALLIZATION KINETICS OF AMORPHOUS NANOTHICKNESS AgGaSe₂ FILMS

A.Ch.MAMEDOVA, D.I.ISMAILOV

The kinetics of phase transformations occurring as a result of crystallization of AgGaSe₂ amorphous films has been investigated by kinematic electron diffraction method. The crystallization AgGaSe₂ of thin amorphous layers, obtained by vacuum deposition on monocrystals of NaCl, KCl occurred in accordance with Avrami-Kolmogorov law and has been described by an analytical expression $V_t = V_0[1 - \exp(-kt^m)]$. The crystallization growth dimensionality at crystallization of AgGaSe₂ amorphous films has been equal to three and energy of activation nucleation ($E_z=17.5\text{ kkal/mol}$) and crystal growth activation energy ($E_g=12.7\text{ kkal/mol}$) have been determined.

Редактор: Ю.Асадов

УДК 631.315.592

РАССЕЯНИЕ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА НА ДЕФЕКТАХ В Ag_2Te

Ф.Ф.АЛИЕВ, Р.А.ГАСАНОВА, Е.Р.ГАСАНОВ, Г.П.ПАШАЕВ

*Институт Физики
Национальной Академии Наук Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр.Г.Джавида,33
farzali@physics.ab.az*

поступила: 27.06.2011
принята к печати: 12.09.2011

Ключевые слова: подвижность, межэлектронные взаимодействия, точечные дефекты, подрешетка, эффективная масса.

РЕФЕРАТ

В теллуриде серебра исследованы температурные зависимости электропроводности и коэффициента Холла в интервале температур 80÷300К при концентрациях электронов $n < 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Установлено, что с ростом температуры увеличивается число дефектов, влияющих на температурную зависимость подвижности и электропроводности в виде $\sim T^{-0,3 \div 0,5}$.

Электрическим и тепловым свойствам Ag_2Te посвящен ряд работ [1-4]. Авторы показали, что закон дисперсии электронов в Ag_2Te подчиняется модели Кейна [1] и при $T > 80\text{К}$ преимущественным механизмом рассеяния носителей заряда является рассеяние на ионных примеси и тепловых колебаниях решетки [2,3]. В интервале температур 80÷250К изучены электронные и фононные доли теплопроводности [5] и установлено, что в Ag_2Te число Лоренца L значительно меньше зоммерфельдовского L_0 , т.е. межэлектронное взаимодействие становится неупругим. Другой особенностью соединения Ag_2Te является дефектность, которая оказывает существенное влияние на кинетические явления. Однако, в литературе отсутствуют данные при концентрациях электронов $n < 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Изучение свойств этих кристаллов, являющихся перспективными материалами в термоэлектрических приборах, работающих в области изотопных сред, представляет особый интерес. Данная работа посвящена исследованию влияния дефектов на электрические свойства Ag_2Te .

На Рис.1 представлены зависимости $\sigma(T)$ и $R(T)$. В образцах $n \approx 1 \div 8 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ $R(T)$ остается постоянной, а $\sigma(T)$ уменьшается с ростом температуры, что характерно для вырожденного электронного газа. Однако, при $n < 1 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ослабляется $\sigma(T)$, что обусловлено слабой зависимостью $U_n(T)$ в исследуемом интервале температур.

Для понимания данного вопроса следует рассчитать температурную зависимость подвижности носителей заряда при возможных механизмах рассеяния. Подвижность носителей заряда при любом вырождении и кейновском законе дисперсии при рассеянии на акустических фононах и на ионах примеси рассчитаны в работах [2-4] (Рис.2). Из Рис.2 (кривые 1, 2) видно, что $U_n(T)$ уменьшается с ростом температуры, а расчетные значения подвижности электронов качественно и количественно не согласуются с экспериментом.

Для выявления причины расхождения расчетных и экспериментальных данных необходимо учитывать новые центры рассеяния.

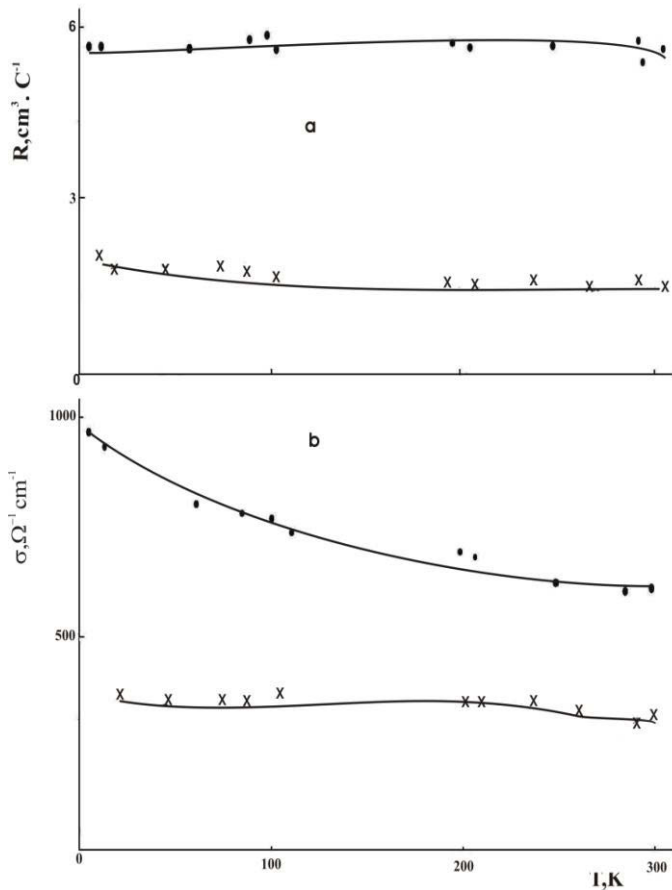


Рис.1.

Температурные зависимости коэффициента Холла $R(T)$ при $H=12$ кЭ (а) и электропроводности $\sigma(T)$ (б).

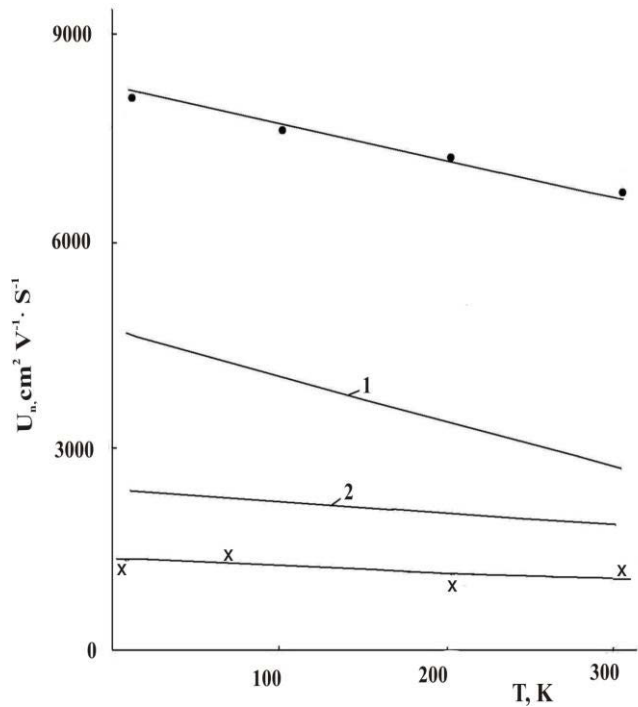


Рис 2.

Температурные зависимости подвижности электронов при концентрациях $n \approx 3.7 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$: 1- расчет по работе [2], 2 - расчет с учетом рассеяния электронов на ионах, акустических фононах и на точечных дефектах.

В работе [6] показано, что Ag_2Te характеризуется дефектами Френкеля, вакансиями Ag в междоузлиях, появляющихся за счет статистически расположенных атомов Ag в подрешетке. Принимая во внимание [2-4], можно учесть вклад подвижности U_d , рассчитанной с помощью времени релаксации при механизме рассеяния электронов на точечных дефектах (по [6] эти дефекты являются точечными) для стандартной зоны как в [7]

$$\tau_d(T) = \frac{\pi \hbar^4}{(2m_n K_o T)^{1/2} m_n V_0^2 N_d} \left(\frac{E}{k_o T} \right), \quad (1)$$

где m_n - эффективная масса электронов на дне зоны проводимости, V_0 - постоянная, характеризующая амплитуду δ -потенциала, N_d - концентрация точечных дефектов, которая определяется следующим образом: в настоящее время применительно к соединениям $A_{2-x}^{I}B^{VI}$ ($A - Cu, Ag, ; B - S, Te, Se$) существуют две модели образования возможных дефектов - Рай [8] и Вейса [9], в каждой из которых определяются доминирующие типы дефектов, обуславливающие отклонение от стехиометрии. В первой модели полагается, что образование дефекта происходит в две стадии: скачком образуется нейтральная вакансия металла V_a , затем происходит ионизация вакансии, в результате чего образуется дырка. Во второй модели возможно внедрение атомов в междоузлия. По модели Рай и Вейса, образование вакансий Ag

в соединениях $Ag_{2-x}B^{\text{II}}$ и последующая их ионизация всегда приводят к р-типу проводимости. Анализ дефектов [8-10] показывает, что в Ag_2Te межузельные атомы Ag обеспечивают n -тип проводимости. В работе [3] показано, что смещение атомов Ag в междоузлиях, играющих роль мелких донорных центров, приводит к соответствующим изменениям электронных явлений. Таким образом дефектами в Ag_2Te будут полностью ионизованные атомы Ag_i^+ и их вакансии (V_{Ag}). По модели Рая [8] получается, что полная концентрация дефектов определяется как $N_d = [V_{Ag}] + [V'_{Ag}]$ (2), а концентрация дырок равна $p = [V'_{Ag}]$.

Применение закона действующих масс приводит к следующему выражению [8]

$$[V_{Ag}] = K_1 \exp(-E_1/K_0T), \quad (3)$$

а формула ионизации нейтральной вакансии имеет вид

$$[p][V'_{Ag}] = [V_{Ag}]K_2 \exp(-E_2/K_0T), \quad (4)$$

где E_1 - энергия образования нейтральной вакансии ($E_1=1,2\text{eV}$ [6]), E_2 - энергия ионизации вакансии серебра ($E_2=2\text{eV}$ [6]), K_1 и K_2 - множители, определяемые по методу [11] и для них получены следующие выражения

$$\lg K_1 = -12,04 + \frac{4617}{T} + 4,618 \lg T, \quad (5)$$

$$\lg K_2 = -18,108 + \frac{2513}{T} + 4,713 \lg T$$

здесь $p = \frac{n_i^2}{n}$, где $n_i = 4,884 \cdot 10^{15} \left(\frac{m_p^* m_n}{m_0^2} \right)^{3/4} T^{3/2} e^{-E_g/2K_0T}$, m_p^* -эффективная масса дырок

($m_p^* = 0,12m_0[2]$), $-E_g$ - ширина запрещенной зоны ($E_g = (0,03 - 7 \cdot 10^{-5}T, K^{-1})\text{eV}[2]$), а

концентрация электронов определяется как в [7]

$$n = \frac{(2m_n K_0 T)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3} I_{3/2,0}^0(\mu_n^*, \beta), \quad (6)$$

где $\beta = K_0 T / E_g$ - параметр непараболичности зоны, $\mu_n / K_0 T, \mu_n$ - химический потенциал, $I_{3/2,0}^0(\mu^*, \beta)$ -двухпараметрический интеграл Ферми. Химический потенциал μ_n^* определяется из следующего выражения [7]

$$\alpha_\infty = -\frac{K_0}{e} \left[\frac{I'_{3/2,0}(\mu_n^*, \beta)}{I_{3/2,0}^0(\mu_n^*, \beta)} - \mu_n^* \right], \quad (7)$$

где α_∞ - термо-эдс электронов в классически сильных магнитных полях (где $\alpha_\infty \approx \alpha_0 + 10\%\alpha_0$). Подставляя (5)-(7) в (3), (4), можно определить N_d , а значения N_d, V_0 и m_n в (1), определяем $\tau_d(T)$. Подвижность $U_d(T)$ определяется как в работе [2]

$$U_d(T) = \frac{e}{m_n} \tau_d(T). \quad (8)$$

Расчитывая рассеяние носителей заряда на ионах и акустических фононах $U_l(T)$ (кривая 1) по методу [2-4], получаем

$$U_n(T) = \left(\frac{1}{U_l} + \frac{1}{U_d} \right). \quad (9)$$

Расчетные данные представлены на Рис.2. Как видно из Рис.2 (кривая 2), расчет по формуле (9) качественно соответствует экспериментальным данным. Количественные несогласия расчетных и экспериментальных данных могут быть связаны с тем, что в этой области ионный радиус атома серебра меньше длины

волны акустического фонона. Здесь также может быть другая причина: в данном интервале температур длина волны электронов меньше, чем радиус экранировки созданных от точечных дефектов. Расчет показывает, что при общем рассеянии вклад точечных дефектов (рассеивающий центр) составляет где-то $\sim 30\%$. Из Рис.2 видно, что для концентрации $n < 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ в зависимости $U_n \sim T^{-\alpha}$ показатель степени составляет $\alpha \approx 0,3 \div 0,5$ т.е. слабо зависит от температуры.

На основе вычисленных данных видно, что включение в расчет механизма рассеяния электронов на точечных дефектах приводит к сближению экспериментальных и расчетных кривых.

Итак, можно сделать вывод, что на энергетическом спектре носителей заряда в Ag_2Te при концентрации $n < 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ в рассеянии существенную роль играют нейтральные и электроактивные точечные дефекты, созданные от атомов серебра.

1. С.А.Алиев, У.Х.Суюнов, М.И. Алиев, *Кинетические явления в $n\text{-Ag}_2\text{Te}$, ФТП*, **7** (1973) 2024-2027.
2. Ф.Ф.Алиев, Э.М.Керимова, С.А.Алиев, *Электрические и термоэлектрические свойства $p\text{-Ag}_2\text{Te}$, ФТП*, **36** (2002) 932-936.
3. Ф.Ф.Алиев, М.Б.Джафаров, *Энергетический спектр носителей заряда в Ag_2Te , ФТП*, **42** (2008) 1297-1302.
4. Ф.Ф.Алиев, М.Б.Джафаров, Г.З.Аскерова, Э.М.Годжаев, *Рассеяние электронов на акцепторных центрах в $p\text{-Ag}_2\text{Te}$ при низких температурах, ФТП*, **44** (2010) 1042-1047.
5. С.А.Алиев, Ф.Ф.Алиев, С.Г.Абдинова, З.С. Гасанов, Д.М.Рагимова, *Теплопроводность и термомагнитные эффекты в Ag_2Te при низких температурах, Изв. вузов, Физика*, №6 (1990) 41-45.
6. A.Andre, C.Simon, *Proprietes electroniques et electrogalvaniques du tellurure d'argent β domaine d'existence, J. Phys. Chem.*, **44** №22 (1983) 95-105.
7. Б.М.Аскеров, *Кинетические эффекты в полупроводниках, Л., «Наука»*, (1970) 320.
8. H.Rau, *Defect equilibria in silver sulphide, J.Phys.and Chem. Sol.*, **35** (1974) 1553-1559.
9. K.Weiss, *Untersuchungen an kubischem Kupfer (I) sulfid (Digenite), Ber. Runsenes. Phys. Chem.*, **75** (1969) 338-344.
10. Г.Б.Абдуллаев, Т.Д.Джафаров, *Атомная диффузия в полупроводниковых структурах, Атом издат*, (1980) 280.
11. H.Rau, *Defect model for cubic high temperature cuprous sulfide (digenite), Sol. St. Commun.*, **16** (1975) 1041-1042.

**Ag_2Te KRİSTALINDA YÜKDAŞIYICILARIN DEFEKTLƏRDƏN SƏPİLMƏSİ
F.F.ƏLİYEV, R.A.HƏSƏNOVA, E.R.HƏSƏNOV, Q.P.PAŞAYEV**

Gümüş telluriddə elektronların $n < 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ konsentrasiyasında $80 \div 300 \text{ K}$ temperatur intervalında elektrikkeçirmənin və Hall əmsalının temperatur asılılıqları tədqiq edilmişdir. Müəyyən olunmuşdur ki, temperaturun artması ilə yürüklüyün və elektrikkeçirmənin $\sim T^{-0,3 \div 0,5}$ şəkildə dəyişməsinə səbəb, temperatur artıqca defektlərin sayının artması ilə əlaqədardır.

**CARRIER SCATTERING BY DEFECTS IN Ag_2Te
F.F.ALIYEV, R.A.HASANOVA, E.R.HASANOV, Q.P.PASHAYEV**

The temperature dependence of electrical conductivity and Hall coefficient in telluride silver in the temperature range $80 \div 300 \text{ K}$ at concentrations of electrons $n < 1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ has been researched. With the temperature rise the number of defects has been increased which have have an influence on the temperature dependence of the mobility and electrical conductivity according to the law $\sim T^{-0,3 \div 0,5}$.

Редактор: Г.Аждаров

УДК: 621.315.592

ФОТОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ ЭЛЕМЕНТ НА ОСНОВЕ КОНТАКТА IrSi–Si

Э.А.КЕРИМОВ

*Институт Космических Исследований Природных Ресурсов
Национального Аэрокосмического Агентства
AZ 1106, ул. С.С.Ахундова 1, корпус 2
E_Kerimov.fizik@mail.ru*

поступила 06.2011 принята к печати 05.09.2011	РЕФЕРАТ В результате экспериментов установлено, что степень поглощения излучения в фоточувствительной структуре IrSi–Si, зависит также от толщины IrSi и диэлектрика. Максимум поглощения наблюдается при толщине IrSi около 90Å, достигая значения $0,30 \pm 0,05\%$ при толщине SiO ₂ 0,75мкм ($\lambda=4,2\text{мкм}$).
Ключевые слова: диод Шоттки, барьер Шоттки, фотоотклик, фотоэмиссия, фото-возбужденные электроны, фото-чувствительность.	

ВВЕДЕНИЕ

Использование многоэлементных приемников излучения в ИК–системах, особенно в системах без оптико–механического сканирования, требует наличия высокой однородности чувствительности у приемных элементов в матрице, так как в противном случае резко возрастает геометрический шум [1]. Для обеспечения эквивалентной шуму разности температур в 0,15К, неравномерность чувствительности детекторов не должна превышать 0,5% при работе в диапазоне 3÷5мкм и 0,2% при работе в диапазоне 8÷14мкм. Геометрический шум многоэлементных матриц может быть устранен в приемном устройстве двух эталонных излучающих поверхностей с высоким и низким уровнями излучения, с последующей цифровой обработкой сигналов каждого приемного элемента по специальному алгоритму.

При использовании такого способа устранения геометрического шума для обеспечения эквивалентной шуму разности температур, например, 0,1К, при условии, что интервал температур объектов воспринимаемых приемным устройством лежит в диапазоне 286÷306К, в цифровой системе выравнивания чувствительность должна быть не менее 12 разрядов [2]. Отсюда видно, какие жесткие требования по быстродействию и разрядности накладываются на цифровую систему обработки сигнала, чтобы обеспечить выравнивание чувствительности и исключить геометрический шум в многоэлементных приемниках излучения с большим числом элементов и, тем самым, создать условия для работы приемного устройства в несканирующем режиме. Существует и принципиально иной путь исключения геометрического шума – создание многоэлементных приемников излучения на основе таких физических механизмов преобразования излучения в электрический сигнал, которые обеспечивают весьма высокую однородность по отдельным элементам. К таким физическим механизмам относится процесс преобразования оптического излучения в электрический заряд на барьерах Шоттки.

Для исключения влияния поверхностных состояний на высоту потенциального барьера Φ_0 и, тем самым, на фотоэлектрические свойства приемников ИК-излучения на основе Шоттки–диодов, последние изготавливают

посредством химической реакции с образованием силицидов, имеющих металлическую проводимость. К таким металлам, например, относятся иридий, палладий и др. В этом случае, барьер Шоттки возникает на границе раздела кремний–силицид металла. Преимуществом такого барьера является отсутствие влияния на его свойства поверхностных дефектов, окислов и загрязнений на поверхности кремния. Подбором необходимого материала можно обеспечить такую высоту барьера, которая определяет чувствительность в требуемом диапазоне ИК – спектра.

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

При изготовлении образцов в качестве подложек использовались пластины кремния n- и p-типов, легированного соответственно бором и фосфором с концентрацией $1,5 \cdot 10^{15} \div 7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$, ориентацией $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, которые подвергались стандартному химическому травлению. После травления пластинки промывались в растворе, состоящем из $\text{HF} + \text{H}_2\text{O}$ (1:10) в течении 10с и в деионизованной воде, после чего проходили цикл термического окисления для образования слоя SiO_2 толщиной $0,4 \div 0,5 \text{ мкм}$. Для уплотнения структуры SiO_2 перед подачей паров воды в реактор и после окончания окисления пластины выдерживались в течении 10 минут в атмосфере сухого O_2 . Первой фотолитографией с последующим травлением слоя SiO_2 в буферном травителе вскрывались окна создания n^+ - и p^+ -охранных областей.

После снятия фоторезиста в смеси «Каро» и химической обработки формировались n^+ -области термической загонкой фосфора в Si. Источником легирующей примеси является POCl_3 . Загонка производится при температуре 950°C в течении 15 минут. При таких режимах получены следующие параметры n^+ -областей: глубина на контрольной пластине КДБ – $10 \langle 100 \rangle$ $x_j = 0,5 \pm 0,02 \text{ мкм}$; поверхностное сопротивление $\rho_s = 8 \div 13 \text{ Ом}/\square$. p^+ -области создавались термической загонкой бора при $T = 950^\circ\text{C}$, $t = 30$ минут. Параметры p^+ - диффузионных областей; глубина $x_j = 0,6 \pm 0,2 \text{ мкм}$; $\rho_s = 80 \pm 20 \text{ Ом}/\square$.

Окна площадью $10^{-6} \div 10^{-5} \text{ см}^2$ в окисном слое открывались методом фотолитографии. На очищенную поверхность кремниевой подложки при помощи вакуумного испарения (был использован также метод магнетронного испарения) при давлении $5 \cdot 10^{-6} \text{ мм.рт.ст.}$ наносилась пленка платины толщиной $100 \div 350 \text{ Å}$. Затем, полученную таким образом структуру Ir/Si подвергали термическому нагреву в интервале температур $530 \div 930 \text{ K}$ в течении $10 \div 60$ минут в вакууме и смеси газов $\text{N}_2 + \text{H}_2$.

Процесс магнетронного распыления проводился на установке «ANAD-2».

В качестве диффузионно–барьерного слоя использован сплав тугоплавких металлов Ti и W. После нанесения металлической пленки осуществлялся отжиг пластин в рабочей камере при температуре 500°C в течении 10 мин. для достижения более однородного содержания сплава TiW.

Для формирования омических контактов использовался алюминий, который наносился магнетронным распылением.

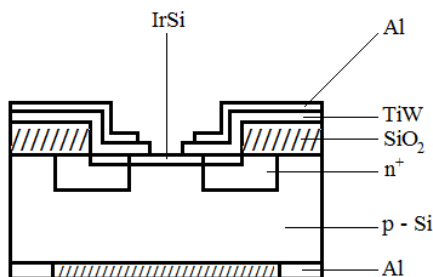


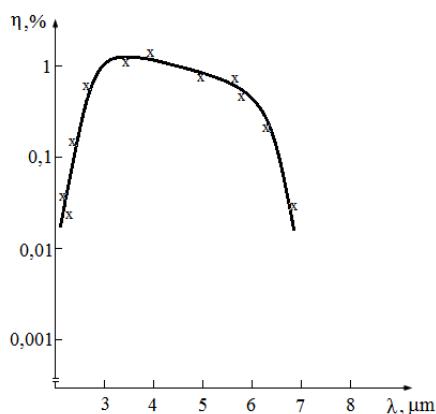
Рис. 1.

Поперечное сечение структур с барьером Шоттки на основе IrSi – Si.

Нами использован метод травления, не требующий маски или дополнительный фоторезист, суть которого заключается в следующем: при двухстадийной термообработке на поверхности IrSi между силицидом и непрореагировавшей платиной образуется окисел кремния, который устойчив к воздействию горячей царской водки в течении 15 минут. Непрореагировавшая платина на окисной пленке и стенках окон в окисле стравливалась раствором царской водки ($\text{HNO}+\text{HCl}+\text{H}_2\text{O}=1:3:4$). Схематический разрез структуры показан на Рис. 1.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ДАННЫЕ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Степень поглощения излучения в фоточувствительной структуре IrSi–Si зависит также от толщины IrSi и диэлектрика. Максимум поглощения наблюдается при толщине IrSi около $90\text{\AA}$, достигая значения $0,30\pm 0,05\%$ при толщине SiO_2 $0,75\text{мкм}$ ($\lambda=4,2\text{мкм}$). При освещении структуры фототок возникал только в том случае, если полярность приложенного напряжения соответствовала отрицательному потенциалу на IrSi. При обратной полярности напряжения фототок незначительно увеличивался по сравнению с тепловым током, однако это



изменение тока было в пределах погрешности эксперимента. Наблюдаемый фототок связан не с объемной фотопроводимостью полупроводниковой пластинки, а с фотоэлектрическими явлениями на контакте: фотоэмиссией из металлического электрода в кремниевую подложку.

На Рис.2 представлено спектральное распределение чувствительности IrSi–p–Si структуры при 80K.

Рис. 2.

Спектральная характеристика IrSi – p – Si при 80K.

Область спектральной чувствительности полностью перекрывает окна прозрачности $3\div 5\text{мкм}$. Спектральная зависимость квантового выхода внутренней фотоэмиссии ДШ (диод Шоттки) описывается

$$Y = \frac{C_1(h\nu - \varphi_B)^2}{h\nu}$$

где φ_B – высота барьера для дырок, C_1 – коэффициент квантовой фотоэмиссии, который зависит от геометрических, оптических и физических свойств контакта Шоттки. Для структур IrSi–p–Si фотоотклик монотонно увеличивается с увеличением энергии ИК излучения. Механизм фоточувствительности фотодиода на основе контакта IrSi–Si недостаточно изучен, имеющиеся в литературе модели зачастую противоречат друг другу. Спектральная чувствительность определяется физикой процесса перехода через барьер, а не процессами фотопоглощения. В [3] показано, что фотовозбуждение электронов в металле (IrSi) создает пустые состояния (дырки), некоторые из которых имеют энергию меньше энергии барьера. Затем или дырка эмитируется из металла в полупроводник, или электрон переходит барьер из полупроводника, чтобы заполнить пустые состояния. Отметим, что предложенный механизм имеет недостатки, т.к. за счет ИК излучения электроны в полупроводнике не получают дополнительную энергию и поэтому не могут переходить через барьер. С другой стороны, известно, что фотодиоды Шоттки работают на основных носителях заряда. Предполагается, что при освещении структур с барьером Шоттки на основе контакта IrSi–Si фотовозбужденные

электроны переходят на более высокие энергетические уровни. При этом, чем больше энергия $h\nu$, тем на более высокие уровни переходят электроны в IrSi. Соответственно и меняется энергия образующихся дырок. Дырки с энергией больше высоты барьера контакта IrSi-Si будут переходить в полупроводник. С увеличением $h\nu$ или с уменьшением длины волны света приращение числа дырок увеличивается. Это приводит к образованию фототока, т.к. для p-Si дырки считаются основными носителями. Значение коэффициента квантовой фотоэмиссии C_1 для структур с кольцевым и сплошным планарным контактом полученные из наклона зависимости

$$\sqrt{Y \cdot h\nu} = \sqrt{C_1}(h\nu - \varphi)$$

равно соответственно 0,13 и 0,05эВ⁻¹. С уменьшением толщины IrSi от 500 до 90Å коэффициент квантовой эмиссии остается постоянным для структур с неколецевым контактом. Зависимость коэффициента C_1 очень чувствительна к толщине PtSi.

Для объяснения экспериментальных результатов была предложена упрощенная одномерная модель для фотоотклика ФД с пленкой диэлектрика. Эта модель предполагает идеальное отражение дырок на границе силицид-изолятор и силицид-полупроводник за исключением дырок, эмитировавших в кремний, и идеальное пропускание границы силицид-металл. Для фотодетектора с кольцевым контактом необходимо учесть многократные отражения дырок на границе IrSi-Si и IrSi-изолятор. В этом случае удобно ввести новый фактор W_i – вероятность того, что горячая дырка от одной границы раздела может достигнуть другой границы раздела, которая является функцией средней длины свободного пробега дырок и толщины силицида

$$W_i = \exp\left(-\frac{d}{l}\right)$$

Тогда фактор улучшения γ ($\gamma = Y_1/Y_2$) представляет собой отношение фотооткликов и выражается следующим образом

$$\gamma = \frac{Y_1}{Y_2} = \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{d}{l}\right)}$$

где при $d=90\text{Å}$ и $\gamma=5$ длина свободного пробега дырок равна 450Å .

1. Е.Ә.Кәримов, PtSi kontaktı əsasında Şottki fotodiodlarının (ŞFD) effektivliyinin artırılmasının fiziki əsasları, *Azerbaijan Journal of Physics Fizika*, XVI №3-4 (2010) 15-
2. А.А.Ширин-заде, Х.А.Асадов, Н.М.Пашаев, Э.А.Керимов, С.А.Фатуллаев, Н.Ф.Казимов, *Полупроводниковые сенсоры, Баку: Элм*, (2010) 179.
3. Э.Х.Родерик, *Контакты металл-полупроводник*, Москва: Наука, (1982) 170.

IrSi – Si KONTAKTI ƏSASINDA FOTOHƏSSAS ELEMENT Е.Ә.КӘРИМОВ

Eksperimentlər nəticəsində müəyyən edilmişdir ki, fotonəssas IrSi – Si strukturunda şüalanmanın udulma dərəcəsi həm də IrSi və dielektrikin qalınlığından asılıdır. Maksimum udulma $0,30 \pm 0,05\%$ qiymətini IrSi təbəqəsinin 90Å qalınlığında alır ki, bu da SiO₂ təbəqəsinin $0,75\text{mkm}$ ($\lambda=4,2\text{mkm}$) qalınlığında müşahidə olunur.

PHOTOSENSITIVE ELEMENT ON THE BASIS OF IrSi - Si CONTACT E.A.KERIMOV

It has been established that absorption degree of radiation in the photosensitive structure IrSi-Si depends also from a thickness IrSi and dielectric. The absorption maximum has been observed at a thickness IrSi near by 90Å and has reached value $0,30 \pm 0,05\%$ at a thickness SiO₂ $0,75\mu\text{m}$ ($\lambda=4,2\mu\text{m}$).

Редактор: А.Абдинов

УДК 666.972.

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНО-ТЕРМИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ АКТИВИРОВАННОГО СТРОИТЕЛЬНОГО ГИПСА

Э.Г.БАШИРОВ, Н.А.ЭЮБОВА

Компания «Матанат А»

AZ 0123, г. Баку, магистраль Баку-Сумгаит 13,5км

Институт Радиационных Проблем НАН Азербайджана

AZ 1143, г. Баку, ул. Ф.Агаева, 9

nazifae@mail.ru

поступила 27.06.2011
принята к печати 12.09.2011

РЕФЕРАТ

Выполнены дифференциально-термические анализы строительного гипса и строительных гипсо-кальцитовых смесей, активированных добавками поверхностно-активных веществ. Изучены процессы, происходящие при твердении активированных составов. Установлено, что активация способствует закреплению молекул ПАВ на поверхности новообразования и улучшает качество затвердевших материалов.

Ключевые слова: дифференциально-термический анализ, гипс, кальцит, поверхностно-активные вещества

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что твердение полуводного гипса происходит вследствие присоединения воды и образования двуводного гипса. Теоретически для этого требуется 18,6% воды от взятой массы. Однако для обеспечения требуемой формуемости теста используется 60...80% воды, в результате этого после химического взаимодействия в объеме материала образуются поры 50...60% затвердевшего гипса [1].

Для снижения объема пористости при затворении теста с водой вводят поверхностно-активные добавки, которые за счет функциональных групп, адсорбирующихся на поверхности зерен и продуктов гидратации, способствуют пластификации теста.

ЭКСПЕРЕМЕНТ И ОБСУЖДЕНИЕ

В наших исследованиях использовались 0,05...0,5% добавки суперпластификаторов на основе нафталинсульфонатов (добавка 1) и лигносульфонатов (добавка 2). Добавки вводились при помоле полуводного гипса [2]. Свойства полуводного гипса оценивались в соответствии с ГОСТ 125-79, результаты испытаний приведены в Таблице 1.

Таблица 1.

Свойства затвердевшего активированного гипса.

№	Составы активированного гипса, %:			Нормальная густота, %	Расплав теста, мм	Физико-механические свойства			
	Полуводный гипс	Добавка 1	Добавка 2			Прочность, МПа:		Средняя плотность, кг/м³	Коэффициент размягчения
						через 2 часа	в сухом состоянии		
1	100			66	180	2,5	7,1	1150	0,35
2	99,9	0,1		58,5	180	3,9	11	1180	0,43
3	99,9		0,1	65	190	3,4	10	1170	0,45

Как видно из Таблицы 1, добавки способствуют снижению количества воды затворения в пределах до 10-12%, а это обуславливает существенное улучшение физико-механических свойств затвердевшего материала.

Изучение процессов, происходящих при твердении полуводного гипса и выяснение влияния активирующих добавок ПАВ нами исследовались посредством проводилось при помощи дифференциально-термического анализа.

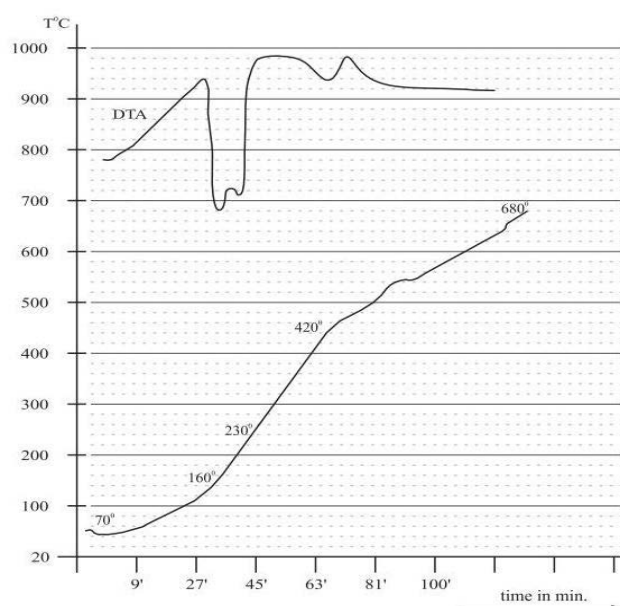
Дериватографические исследования проводились на Q дериватографе системы Паулик-Паулик Эрден фирмы МОМ (Венгрия) [3]. Навеска массой 450÷550мг, подвергалась нагреву в интервале температур 20...1000°C, при скорости нагрева 20°/мин. В качестве эталона для записи температуры служила окись алюминия Al_2O_3 , прокаленная при 1000°C в течении 10...12 часов.

Таблица 2.

Дифференциально-термический анализ затвердевшего гипса.

Состав	Дифференциально-термические эффекты T°C			Термогравиметрический анализ TG (интервал и потери массы), T°C/%	
	эндотермический		экзотермический		
	I	II	III	I	II
Гипс (без добавки)	160	230	420	100-160/15	160-230/5
Тоже с супер-пластификатором	100	128	240	80-100/0,5	100-128,7/16,5

Как видно из дериватограммы контрольного образца затвердевшего гипса $CaSO_4 \cdot 2H_2O$ (Рис.1 и Таблица 2.) на кривой ДТА обнаружены два эндотермических эффекта при 160 и 230°C и один экзотермический эффект при 420°C.



Первый эффект при 160°C обусловлен дегидратацией гипса до полуводного, приводящего согласно расчетам TG кривой к потере воды 15,0% а при втором эффекте при T=230°C происходит дальнейшее обезвоживание гипса до безводного $CaSO_4$ и теряется 5,00% воды. В исследованном составе гипса всего содержалось примерно 20,00%. Экзотермический эффект при 420°C соответствует перестройке кристаллической решетки $CaSO_4$.

Рис.1.

Дериватограмма затвердевшего гипса.

Как видно из дериватограмм активированного гипса (Рис. 2 и Рис. 3) не зависимо от вида добавок получены идентичные эндоэффекты при тех же температурах обезвоживания двуводного гипса и такие же потери воды. Однако в составе без добавки потеря воды на 1,2-1,5% меньше, чем в образцах активированного гипса. Необходимо отметить, что в образцах без добавки, подвергнутых высушиванию и последующему водонасыщению, потеря воды увеличилась до 25,5%, а активированные составы имели потери в количестве 19%,

что, видимо, обусловлено частичной последующей гидратацией затвердевших составов без добавки (Таблица 3).

Таблица 3.

Дифференциально-термический анализ затвердевшего гипса после водонасыщения и высушивания.

Состав	Дифференциально-термические эффекты T°С			Термогравиметрический анализ СТГ (интервал темп. и потери массы), T°С/%	
	эндотермический	экзотермический			
	I	II	III	I	II
Гипс (без добавки)	93	130	285	93-130/25,5	140-620/6,76
Тоже с доб. 1	100	130	285	100-130/19	140-665/6
Тоже с доб. 2	105	140	290	100-130/17,45	130-670/8,15

Из проведенных экспериментальных данных следует, что независимо от вида и количества введенных добавок ПАВ на кривых ДТА наблюдаются идентичные термоэффекты. Температура дегидратации и интенсивность эффектов смещаются в сторону низких температур, между ними появляются дополнительные эффекты, свидетельствующие о возникновении новообразований (Таблица 2).

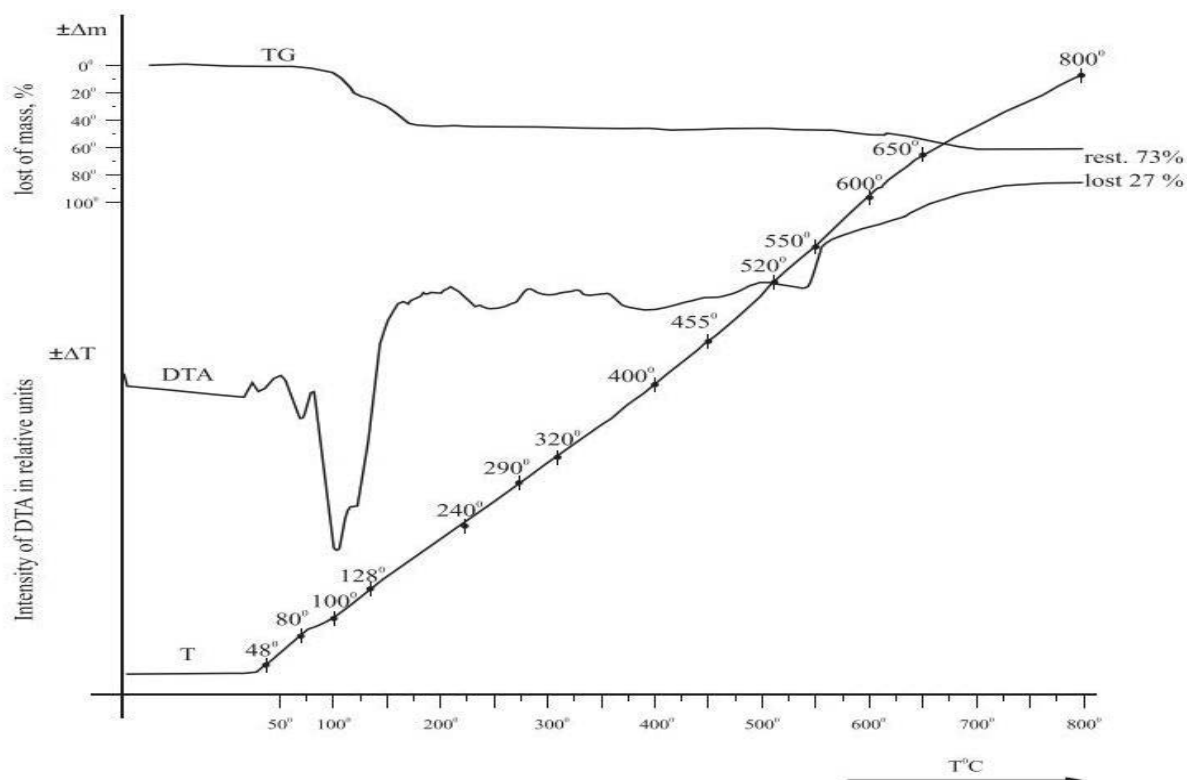


Рис.2.

Дериватограмма затвердевшего гипса с добавкой 1.

На Рис.3 приведены дериватограммы смеси затвердевшего гипса с кальцитом в количестве 10 и 20% по массе, в Таблице 4 сведены термические показатели по расчетам кривых ДТА и TG. Как видно из приведенных данных, на кривой ДТА состава 90:10 гипс:кальцит наблюдается один эндотермический эффект при 130°C, обусловленный дегидратацией полуводного затвердевшего гипса. При этом потеря воды составляет 4,5%.

Экзотермический эффект при 345°C соответствует перестройке решетки гипса после дегидратации. Эндотермический эффект при 690°C соответствует диссоциации обезвоженного гипса вещества и имеющегося в составе кальцита. В составе гипс:кальцит (80/20) на кривой ДТА 2 появляется широкий эндотермический эффект при 430°C, сопровождающийся потерей массы 2,18% (кривая TG2).

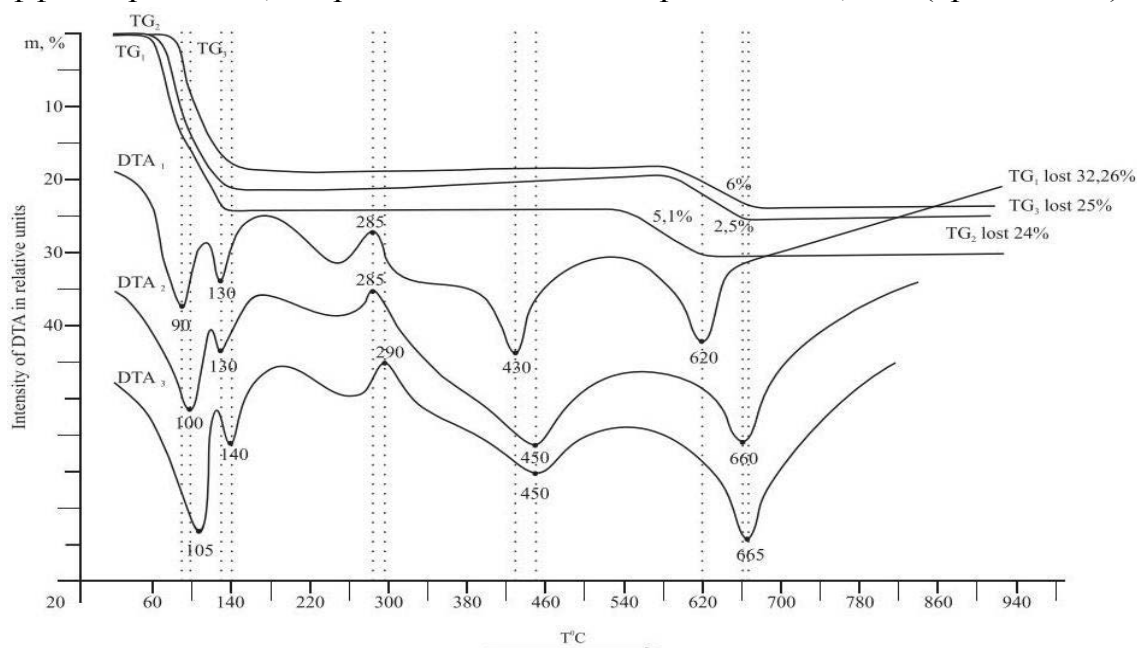


Рис.3.

Дериватограмма затвердевшего гипса ПАВ: ДТА₁ и TG₁ гипс без добавки;
ДТА₂ и TG₂ с добавкой 1 - 0,2%, ДТА₃ и TG₃ с добавкой 2 - 0,05%.

В составе 90:10 (гипс: кальций) с добавкой ПАВ 0,2% на кривой ДТА3 (Рис.4) появляется новый экзотермический эффект при 565°C, обусловленный новообразованием. Количество потери воды уменьшилось на 0,3% по сравнению с составом 90/10 без добавки (Таблица 4). Эндотермический эффект при 700°C соответствует совместной диссоциации известняка новообразования. Новообразование, видимо, обусловлено тем, что на поверхности смеси состава 90:10 химосорбция поверхностно-активной добавки приводит в подвижность молекулы гипса и кальцита, которые внедряются в поры решетки известняка. Анализ термогравиметрических расчетов по кривым TG, приведенным в Таблице 1 и Таблице 2 показывает, что введение добавки ПАВ в известняк уменьшает сорбцию влаги из воздуха вследствие повышения гидрофобизации поверхности.

Таблица 4.

Термические показатели затвердевших составов смеси гипса с кальцитом.

Состав Гипс: кацит, %	Дифференциально-термические эффекты T°C			Термогравиметрический анализ TG (интервал темп. и потери массы), T°C/%	
	эндотермический		экзотермический		
90:10	65-130	130	345	130-690/11,7	16,2
90:20	65-130	130		130-700/122	17,3
90:10*	65-130	140	565	500-565/2,5	14,7

Образование на поверхности смеси 90:10 (гипса: кальцит) химосорбционных слоев из ПАВ способствует понижению сил капиллярного всасывания влаги из воздуха, препятствующих продвижению влаги через гипс.

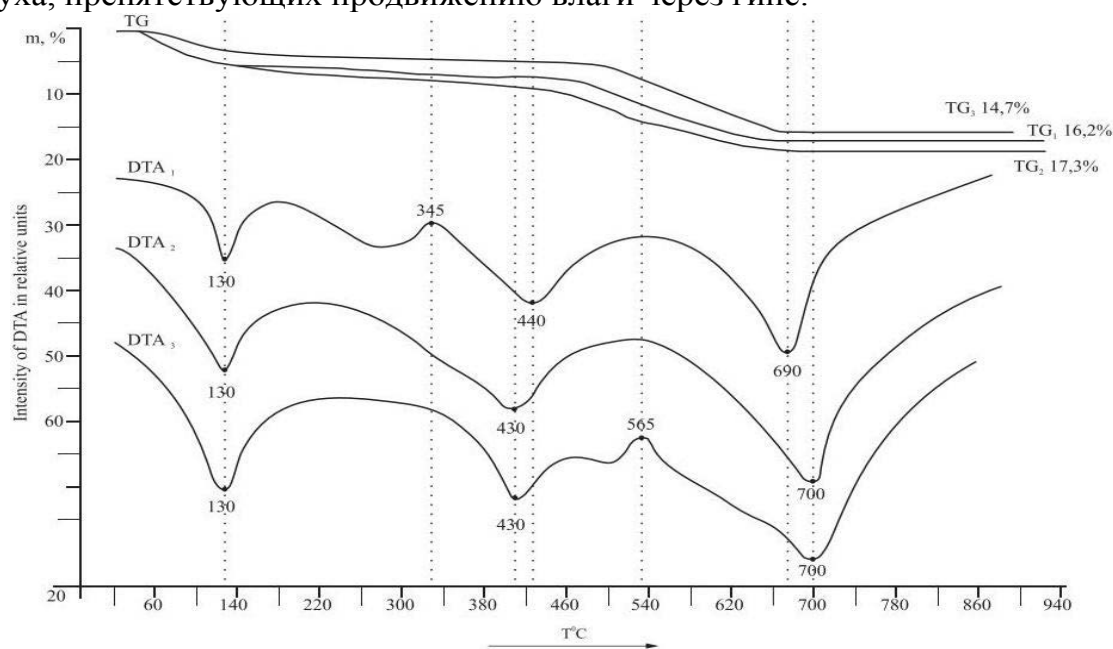


Рис.4.

Дериватограмма затвердевшего гипса:

DTA₁ и TG₁ – 90/10; DTA₂ и TG₂ – 80/20; DTA₃ и TG₃ 90/10 с добавкой бенафтон 0,2%.

Таким образом, из расчетов термических эффектов, обнаруженных на кривых ДТА, можно прийти к заключению, что добавка в смесь 90:10 способствует улучшению качества затвердевшего гипса и уменьшает поглощение воды из атмосферы, которая в гипсе находится в виде адсорбционных полимолекулярных слоев. Под влиянием химосорбции ПАВ в смеси 90:10 молекулы гипса вступают во взаимодействие в контактном слое с минеральным порошком кальцита и закрепляют молекулы добавки на поверхности новообразования и, тем самым, улучшают качественные показатели затвердевшего гипсо-известняковой смеси.

1. Ю.М.Бутт, М.М.Сычев, В.В.Тимашев, *Химическая технология вяжущих материалов*, М., Высшая школа, (1980) 472.
2. Е.Н.Вәшіров, *Aktivləşdirilmiş gipsin və əhəng daşın alınması üsulu*, Patent A2-0223 (2010).
3. Л.Г.Берг, *Введение в термографию*, М., Наука, (1969) 154.

İNŞAAT GİPSİNİN DİFERENSİAL-TERMİKİ TƏDQİQATLARI

E.H.BƏŞİROV, N.A.EYYUBOVA

Səthi aktiv maddələr ilə inşaat gipsinin və kalsid qarışıqlarının differensial-termiki analizləri aparılmışdır.

Aktivləşdirmiş tərkiblərin bərkiməsi zamanı yaranmış proseslər tədqiq edilmişdir. Təyin edilmişdir ki, aktivləşdirilmə nəticəsində SAM mələkulları yeni əmələgəlmələrin üzərində saxlanılır və bərkimiş materialların keyfiyyətini yüksəldir.

THE DIFFERENTIAL THERMAL ANALYSIS OF ACTIVATED GYPSUM PLASTER

E.H.BASHIROV, N.A.EYYUBOVA

The differential thermal analyses of gypsum plaster and premixed calcite-plaster, activated admixture of surface materials have been executed. The processes of hardening activated compounds have been studied. It has been established that the activation has promoted fixed molecules keep on the surface of tumors and has improved quality of hardened materials.

Редактор: А.Аббасов

УДК 621.315.592

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ И $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$ МЕТОДОМ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ РЕНТГЕНОГРАФИИ

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

*Институт физики НАН Азербайджана
AZ 1143, Баку, пр. Г. Джавида, 33
yusifasadov@rambler.ru*

поступила: 31.03.2011
принята к печати: 20.06.2011

Ключевые слова: полиморфизм, полиморфные превращения, модификация, энантиотропия.

РЕФЕРАТ

Методом рентгеновской дифракции исследованы полиморфные превращения в полученных нами кристаллах $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ и $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$. От комнатной до температуры плавления в обоих кристаллах установлены четыре различных модификации. Определены температуры превращения и параметры элементарных ячеек кристаллов этих модификаций.

Изучение закономерностей полиморфного превращения в нитратовых соединениях щелочных металлов имеет не только научный, но и практический интерес, так как этот процесс тесно связан с вопросами технологии получения монокристаллов смешанного состава, обладающих полиморфизмом.

В интервале температур от комнатной до температуры плавления ($T_{\text{пл}}=587\text{K}$) у нитрата рубидия установлены четыре различных модификации. При комнатной температуре IV-модификация имеет ромбоэдрическую решетку с симметрией $R\bar{3}1$ [1]. При температуре $T>437\text{K}$ ромбоэдрическая модификация превращается в кубическую III-модификацию с симметрией $Fm\bar{3}m$ [2]. При температуре $T>492\text{K}$ III-кубическая модификация превращается в ромбоэдрическую II-модификацию с симметрией $Pm\bar{3}m$ [3] и при $T>564\text{K}$ эта модификация в свою очередь превращается в кубическую I-модификацию с симметрией $Fm\bar{3}m$ [4]. Превращения $IV\leftrightarrow III\leftrightarrow II\leftrightarrow I$ относятся к числу энантиотропных.

Нитрат цезия при комнатной температуре кристаллизуется в ромбической псевдотригональной сингонии с симметрией $R3/m$ (II-модификация) [5] и это модификация при $T>434\text{K}$ превращается в кубическую (I-модификация) с симметрией $Pa\bar{3}$ [6]. Превращения $II\leftrightarrow I$ в нитрате цезия относятся к числу энантиотропных.

На основе полученных данных о морфологии и кинетике полиморфных превращений в нитратах рубидия и цезия выявлено существование новых х-модификаций между III и IV модификациями в нитрате рубидия [7], и I и II модификациями в нитрате цезия [8].

В работе [9] молекулярно-динамическим моделированием исследованы структурные фазовые превращения в нитратах рубидия и цезия, а в [10] - методом ДСК составлена фазовая диаграмма системы $\text{RbNO}_3\text{-CsNO}_3$.

Исследования твердых растворов нитрата цезия в нитрате рубидия показывают, что I и III модификации не наблюдаются в твердых растворах при концентрации соли цезия $\sim 25\text{мол \%}$ [11].

Для выяснения закономерностей полиморфных превращений в твердом растворе нитрата цезия и нитрате рубидия нами проведена серия микроскопических и рентгенографических исследований. Целью которых является установление влияния на механизм этих превращений в нитрате рубидия

частичного замещения ионов Rb^{1+} ионами Cs^{1+} . Настоящая работа является частью запланированных нами серий работ [12,13,14] посвящена рентгенографическому исследованию полиморфных превращений в этих твердых растворах которые ранее не исследовались.

Монокристаллы $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ и $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$, были получены из водного раствора при комнатной температуре (IV-модификация). Для совершенства и чистоты полученных кристаллов нитраты рубидия и цезия марки «ХЧ» подвергались дополнительной очистке путем многократной кристаллизации. Полученные хорошо ограненные кристаллы размерами в среднем $1 \times 0,5 \times 10 \text{ мм}$ имели разнообразные внешние формы. Для рентгенографических исследований из этих монокристаллов получены образцы в виде порошка, так рентгенографические исследования проведены на порошковом дифрактометре типа D8 ADVANCE фирмы “Bruker” при режиме 40kV, 40mA, CuK_α -излучения ($\lambda=1.5406 \text{ \AA}$), на температурной камере типа ТТК723К в интервале температур $77\text{K} < T < 723\text{K}$.

1. Зафиксированные в образце $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ 11 четких дифракционных отражений индицируются в ромбоэдрической сингонии с параметрами элементарной ячейки в гексагональной установке: $a=10.484 \text{ \AA}$, $c=7.459 \text{ \AA}$, пр.гр. R31. После записи дифракционных отражений при комнатной температуре, при повышении температуры образца проводились записи через каждые 10К. Перед началом каждой записи температура образца поддерживалась постоянной в течении 30 минут.

По изменениям интенсивности тех структурно чувствительных отражений, которые исчезают при структурных превращениях, была определена температура превращения в $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ и установлено, что при $T=500 \pm 1 \text{ K}$ ромбоэдрическая модификация превращается в кубическую с параметрами элементарной ячейки $a=4.372 \text{ \AA}$, пр.гр. $\text{Pm } \bar{3} \text{ m}$, а при температуре $T=500 \div 1 \text{ K}$ происходит обратный процесс.

Анализ дифракционных записей, зафиксированных при разных температурах показывает, что в интервале температур $500 \div 550 \text{ K}$ в количествах дифракционных отражений и их интенсивностях существенных изменений не происходят. Только при температуре $550 \pm 1 \text{ K}$ прежние дифракционные отражения исчезают и появляются новые отражения принадлежащие не кубической решетке как показана в [3], а тетрагональной решетке с параметрами $a=3.942 \text{ \AA}$, $c=8.765 \text{ \AA}$, пр.гр. I4.

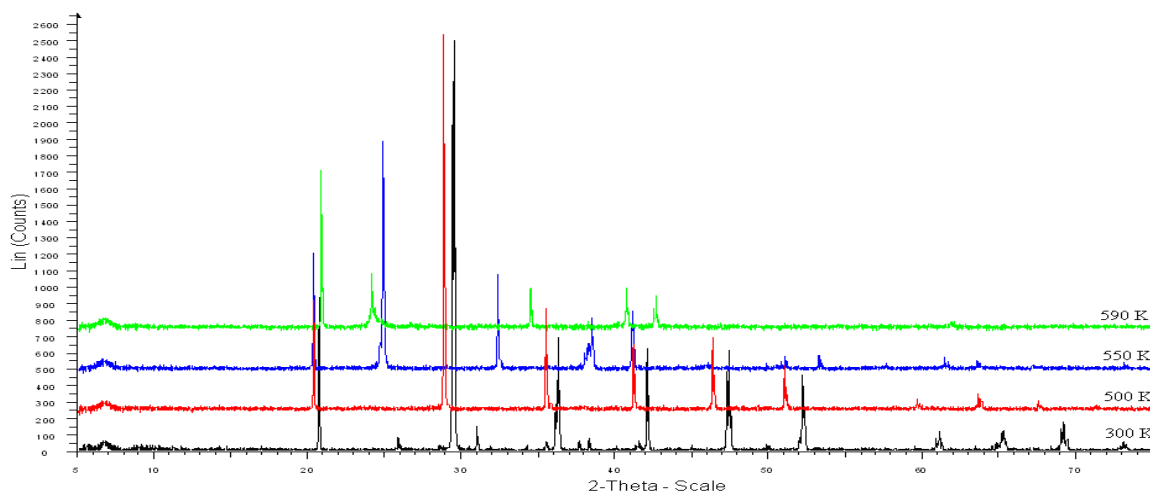


Рис.1.

Дифракционная картина $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ при различных температурах.

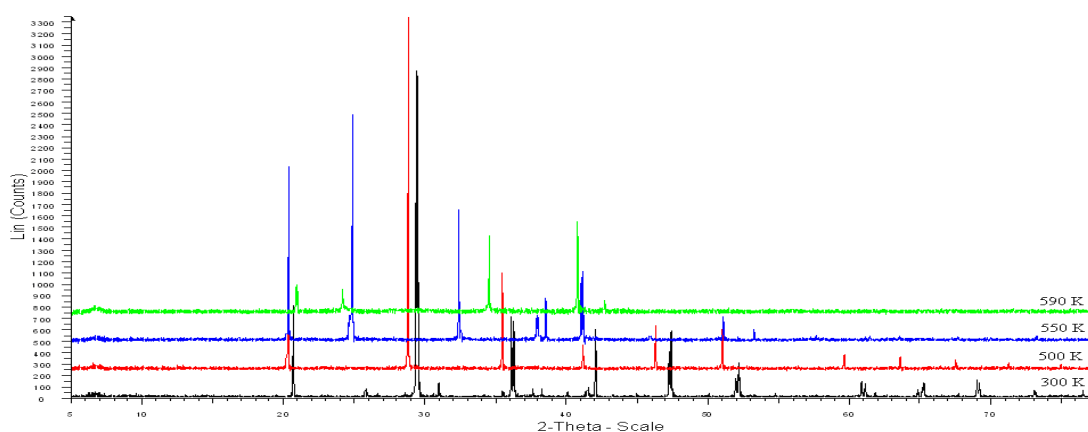
В интервале температур 551÷590К число и интенсивность зафиксированных отражений остаются без изменения, а при температуре $T=590\pm 1\text{K}$ дифракционные отражения, принадлежащие тетрагональной решетке полностью исчезают и появляются новые дифракционные отражения, которые индуцируются на основе кубической решетки с параметром $a=7.370\text{\AA}$, пр.гр. $\text{Fm}\bar{3}m$. Расчет дифрактограм кристалла $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ записанных при разных температурах приведен в Таблице 1, а на Рис.1 представлена дифракционная картина исследуемого кристалла при различных температурах. При охлаждении образец $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ возвращается в исходное состояние, т.е. полиморфные превращения в данном образце имеют энантиотропный характер.

Таблица 1.

Расчет дифрактограммы кристалла $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$, записанных при разных температурах (излучения $\text{CuK}\alpha$, $\lambda=1.5406\text{\AA}$, 40kV, 40mA).

$T_{\text{экс. К}}$	2θ	$d_{\text{экс. \AA}}$	$I/I_0, \%$	hkl	Параметры элементарной ячейки, \AA
300	20.69 ⁰	4.288	37.9	111	Ромбоэдрическая $a=10.484\text{\AA}$ $c=7.459\text{\AA}$ пр.гр. $\text{R}\bar{3}1$
	29.36 ⁰	3.038	100	112	
	29.41 ⁰	3.026	97.5	300	
	31.08 ⁰	2.881	9.1	202	
	36.09 ⁰	2.486	17.4	003	
	36.3 ⁰	1.472	25.9	221	
	38.26 ⁰	1.35	38,1	302	
	42.1 ⁰	1.144	38.3	222	
	47.27 ⁰	1.921	26.3	303	
	52.23 ⁰	1.749	10.7	41	
	69.12 ⁰	1.357	8.2	144	
500	20.29 ⁰	4.372	38.9	100	Кубическая $a=4.372\text{\AA}$ пр.гр. $\text{Pm}\bar{3}m$
	28.85 ⁰	3.092	100	110	
	35.52 ⁰	2.524	21.2	111	
	41.25 ⁰	2.186	10.9	200	
	46.39 ⁰	1.955	10.6	210	
	51.12 ⁰	1.785	2.7	211	
	63.8 ⁰	1.457	1.7	300	
550	20.28 ⁰	4.375	43.5	002	Тетрагональная $a=3.942\text{\AA}$ $c=8.765\text{\AA}$ пр.гр. $\text{I}4$
	24.83 ⁰	3.582	100	101	
	32.37 ⁰	2.763	45.5	110	
	38.22 ⁰	2.352	8.8	112	
	38.47 ⁰	2.338	23.4	103	
	41.13 ⁰	2.192	23	004	
	51.1 ⁰	1.785	6.1	202	
	53.29 ⁰	1.717	6.7	114	
	61.51 ⁰	1.506	5.2	123	
590	20.86 ⁰	4.255	100	111	Кубическая $a=7.370\text{\AA}$ пр.гр. $\text{Fm}\bar{3}m$
	24.13 ⁰	3.685	37.2	200	
	34.39 ⁰	2.605	5.1	220	
	40.56 ⁰	2.222	3.7	311	
	42.45 ⁰	2.127	0.4	222	

- Аналогичные эксперименты проведены в кристаллах $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$ и установлено, что в данном образце полиморфные превращения происходят по той же схеме как в $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$, но только с некоторым различием в параметрах элементарной ячейки. В Таблице 2 приведены расчеты дифрактограмм кристалла $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$ записанных в различных температурах, а в Рис.2. дифракционная картина процесса превращения в исследуемых кристаллах.

**Рис.2.**

Дифракционная картина $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$ при различных температурах.

Таблица 2.

Расчет дифрактограммы кристалла $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$, записанных при разных температурах (излучения $\text{CuK}\alpha$, $\lambda=1.5406\text{\AA}$, 40kV, 40mA).

$T_{\text{экс. К}}$	2θ	$d_{\text{экс. \AA}}$	$I/I_0, \%$	hkl	Параметры элементарной ячейки, $\text{\AA}$
300	20.69^0	4.288	23.7	111	Ромбоэдрическая $a=10.482\text{\AA}$ $c=7.458\text{\AA}$ пр.гр. $R\bar{3}1$
	29.37^0	3.038	100	112	
	29.49^0	3.026	84.1	300	
	31.01^0	2.881	3	202	
	36.1^0	2.486	26.9	003	
	36.3^0	2.472	18.8	221	
	38.27^0	2.349	2.5	302	
	42.1^0	2.144	17.7	222	
	47.44^0	1.35	22.1	411	
	52.24^0	1.914	10.2	142	
	69.324^0	1.749	5	224	
500		1.519	4	252	Кубическая $a=4.377\text{\AA}$ пр.гр. $Pm\bar{3}m$
	20.29^0	4.372	38.9	100	
	28.85^0	3.092	100	110	
	35.52^0	2.524	21.2	111	
	41.25^0	2.186	10.9	200	
	46.39^0	1.955	10.6	210	
	51.12^0	1.785	2.7	211	
550	63.8^0	1.457	1.7	300	Тетрагональная $a=3.947\text{\AA}$ $c=8.738\text{\AA}$ пр.гр. $I4$
	20.28^0	4.375	43.5	002	
	24.83^0	3.582	100	101	
	32.37^0	2.763	45.5	110	
	38.22^0	2.352	8.8	112	
	38.47^0	2.338	23.4	103	
	41.13^0	2.192	23	004	
	51.1^0	1.785	6.1	202	
	53.29^0	1.717	6.7	114	
590	61.51^0	1.506	5.2	123	Кубическая $a=7.362\text{\AA}$ пр.гр. $Fm\bar{3}m$
	20.86^0	4.255	100	111	
	24.13^0	3.685	37.2	200	
	34.39^0	2.605	5.1	220	
	40.56^0	2.222	3.7	311	
	42.45^0	2.127	0.4	222	

По результатам экспериментальных данных в кристаллах $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ и $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$ в интервале температур 300÷600K происходят структурные превращения по следующей схеме:

При охлаждении образец $\text{Rb}_{0.90}\text{Cs}_{0.10}\text{NO}_3$ возвращается в исходное состояние, т.е. полиморфные превращения в данном образце имеют энантиотропный характер. Структурные данные отдельных модификаций и температурные интервалы существования их приведены в Таблице 3. Таким образом рентгенографические исследования показывают, что в $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ и $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$, как и в нитрате рубидия при нормальном давлении от комнатной до температуры плавления имеются четыре полиморфных модификаций и частичное изоморфное замещение ионов Rb^{1+} ионами Cs^{1+} в определенной мере влияет на температуры превращения и температурный интервал существования полиморфных модификаций.

IV- Ромбоэдрическая модификация		↔	III- Кубическая модификация	↔	II- Тетрагональная модификация	↔	I- Кубическая модификация
$\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$	a=10.484Å c=7.459Å		a=4.372Å		a=3.942Å c=8.765Å		a=7.370Å
$\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$	a=10.482Å c=7.458Å	500±1K	a=4.377Å	550±1K	a=3.947Å c=8.738Å	590±1K	a=7.362Å
пр.гр. P31			пр.гр. Pm $\bar{3}$ m		пр.гр. I4		пр.гр. Fm $\bar{3}$ m

Для сравнения в Таблице.3. приводятся значения температурных интервалов существования полиморфных модификаций в нитрате рубидия [1-4] и в $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ и $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$.

Таблице.3.

Температурный интервал существования полиморфных модификации RbNO_3 , $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ и $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$.

Состав	IV-модификация	III-модификация	II-модификация	I-модификация
RbNO_3	Ниже 437K	437-492K	492-564K	564-587K
$\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$	300-500K	500-550K	550-590K	590-600K
$\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$				

Полиморфные превращения в исследуемых кристаллах носят энантиотропный характер, что и подтверждается морфологическими исследованиями, проведенными под оптическим микроскопом [15]. Также установлено, что III-модификация исследуемых кристаллов не имеет кубическую, как была показана в [3], а тетрагональную решетку и х-модификация, обнаруженная между IV и III модификациями в нитрате рубидия [7], в $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ и $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$ отсутствует.

1. R.N.Brown, A.C.Mclaren, *The thermal transformations in solid rubidium nitrate*, *Acta Cryst.*, **15** (1962) 974-978.
2. R.N.Brown, A.C.Mclaren, *The mechanism of the thermal transformation in solid rubidium and ammonium nitrate*, *Proc. Roy. Soc.*, **266** (1962) 329-34.
3. U.Korhonen, *The crystal structure of RbNO_3* , *Ann. Acad. Sci. Fennicae.*, Ser. 1, **102** (1951) 37-41.

4. L.Pauling, J.Sherman, *Note on the crystal structure of rubidium nitrate*, *Z.Kristallogr. Kristallognom*, **84** (1953) 213-215.
5. C. Finback, O. Hassel, *The structure of CsNO₃*, *Z. Physik*, **5** (1937) 460-465.
6. U. Korhonen, *The crystal structure of cesium nitrate*, *Ann. Acad. Sci. Fennicae.Ser.*, **150** (1953) 1-16.
7. Э.В.Насиров, В.И. Насиров, Ю.Г. Асадов, *Морфология роста кристаллов при полиморфных III↔II↔I превращениях в нитрате рубидия*, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXVI** № 5 (2006) 150-153.
8. В.И.Насиров, Ч.М.Алекперов., Ф.Г.Магеррамова, *Полиморфные превращения в CsNO₃*, *Изв. Азерб. Пед. Университета*, №1-2 (1995) 70-76.
9. J.Lin, C.Duan, M.Ossowski, W.Mei, R.Smith, J.Hardy, *Molecular dynamics simulation of structural phase transitions in RbNO₃ and CsNO₃*, *J.Sol.State Chem.*, **60** (2001) 222-229.
10. E.A.Secco, R.A.Secco, *Heats of solution/substitution in TlNO₃ and CsNO₃ crystals and in RbNO₃ and CsNO₃ crystals from heats of transition: the complete phase diagrams of TlNO₃-CsNO₃ and RbNO₃-CsNO₃ systems*, *J.Phys and Chem. of Solids*, **63** (2002) 433-440.
11. E.C.Schlemper, W.C.Hamilton, *The phase diagrams of system RbNO₃ -CsNO₃*, *J. Chem. Phys.*, **408** (B) (1966) 4498-4502.
12. В.И.Насиров, А.Ф.Хазиева., Ю.Г.Асадов, *Полиморфные IV↔III↔II↔I превращения в Rb_{0,95}Cs_{0,05}NO₃*, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXIX** №5 (2009) 157-161.
13. А.Ф.Хазиева, Ю.Г.Асадов, В.И.Насиров, *Полиморфные превращения в монокристаллах Rb_{0,950}Cs_{0,05}NO₃*, *Докл. НАН Азерб.*, **65** (2009) 66-70.
14. В.И.Насиро., А.Ф.Хазиева, Ю.Г.Асадов, *Полиморфные превращения в монокристалл↔монокристалл Rb_{0,975}Cs_{0,025}NO₃*, *Кристаллография*, **56** (2011) 990-994.
15. А.Ф.Хазиева, В.И.Насиров, Ю.Г.Асадов, Ю.И.Алыев, *Полиморфные превращения в монокристаллах Rb_{0,975}Cs_{0,025}NO₃*, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXX** №5 (2010) 87-91.

**YÜKSƏKTEMPERATURLU RENTGENOQRAFİK METOD VASİTƏSİLƏ
Rb_{0,975}Cs_{0,025}NO₃ VƏ Rb_{0,950}Cs_{0,05}NO₃-DƏ POLİMORF ÇEVİRLMƏLƏRİN TƏDQIQI**

V.İ.NƏSİROV, A.F.HƏZİYEVA, Y.Q.ƏSƏDOV, Q.H.HÜSEYNOV

Rentgenoqrafik difraksiya metodu ilə suda məhluldan alınan Rb_{0,975}Cs_{0,025}NO₃ və Rb_{0,950}Cs_{0,05}NO₃ kristallarında polimorf çevrilmələr tədqiq olunmuşdur. Otaq temperaturundan ərimə temperaturuna kimi hər iki kristalda dörd müxtəlif polimorf modifikasiya müəyyən edilmişdir. Həmin kristallarda bütün modifikasiyaların kristal qəfəslərinin parametrləri və keçid temperaturları təyin olunmuşdur.

**RESEARCH OF POLYMORPHIC TRANSFORMATIONS IN Rb_{0,975}Cs_{0,025}NO₃ AND
Rb_{0,950}Cs_{0,05}NO₃ BY METHOD OF HIGH-TEMPERATURE X-RAY**

V.I.NASIROV, A.F.HAZIEVA, Yu.G.ASADOV, Q.Q.QUSEINOV

Rb_{0,975}Cs_{0,025}NO₃ and Rb_{0,950}Cs_{0,05}NO₃ have been investigated by method of x-ray diffraction polymorphic transformations. In both crystals from room temperature to the melting temperature four various updating have been established. Temperatures of transformation and parameters of elementary cells of crystals of these updatings have been defined.

Редактор: И.Нуриев

УДК 621.374

МОДЕЛИРОВАНИЕ АНИЗОТРОПНОГО ПРЯМОУГОЛЬНОГО ВОЛНОВОДА, ЧАСТИЧНО ВНЕДРЕННОГО В АНИЗОТРОПНУЮ ПОДЛОЖКУ

И.Дж.ИСЛАМОВ, М.Б.ДЖАФАРЗАДЕ

*Азербайджанский Технический Университет
AZ 1073, Баку, пр. Г.Джавида, 25
icislamov@mail.ru, jafarzademb@yahoo.com*

поступила: 02.05.2011
принята к печати: 13.06.2011

Ключевые слова: СВЧ, анизотропный прямоугольный волновод, анизотропная подложка, моделирование анизотропного прямоугольного волновода.

РЕФЕРАТ

С учетом дифракции рассматривается задача моделирования анизотропного прямоугольного волновода, частично внедренного в анизотропную подложку. Проведены численные расчеты анизотропного волновода. Экспериментально исследован прямоугольный анизотропный волновод в СВЧ диапазоне. Сопоставление теоретических и экспериментальных данных показывает, что одноволновое приближение достаточно точно описывает основные типы прямоугольных анизотропных волноводов.

ВВЕДЕНИЕ

Исследование распространения электромагнитных волн вдоль прямоугольных диэлектрических волноводов имеет большой научный и практический интерес. Это, в первую очередь, связано с тем, что такие волноводы не только могут служить для ограничения и направления электромагнитного сигнала, но и являются основой различных устройств телекоммуникации. Следует отметить, что строгая теория прямоугольных волноводов далека от завершения. Существующие методы расчета условно можно разделить на численные и аналитические [1-3]. Численные методы применимы, как правило, для волноводов с малыми перепадами диэлектрической проницаемости [3] или, окруженных однородной средой. Наибольший интерес представляют приближенные методы, поскольку они применимы к более широкому кругу задач. Необходимо отметить, что приближенные методы анализа [5-8] не дают полного решения граничной задачи, но их отличает простота конечных результатов. Так, постоянная распространения мод находится из характеристических уравнений для двух плоских волноводов. При этом различные методы отличаются лишь выбором показателей преломления этих волноводов. Для получения полной картины распределения поля в прямоугольном волноводе необходимо учесть дифракцию волн на гранях волновода.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В настоящей работе приближенно, но с учетом дифракции, рассматривается задача моделирования анизотропного прямоугольного волновода, частично внедренного в анизотропную подложку. Задача решается методом частичных областей в одноволновом приближении, суть которого заключается в следующем. Поле в центральной части волновода представляется модой плоского волновода. При взаимодействии с боковыми гранями предполагается, что мода отражается преимущественно в себя. Приближенное согласование полей на границах частичных областей приводит к нахождению амплитуд разложений и дисперсионному уравнению относительно постоянной распространения.

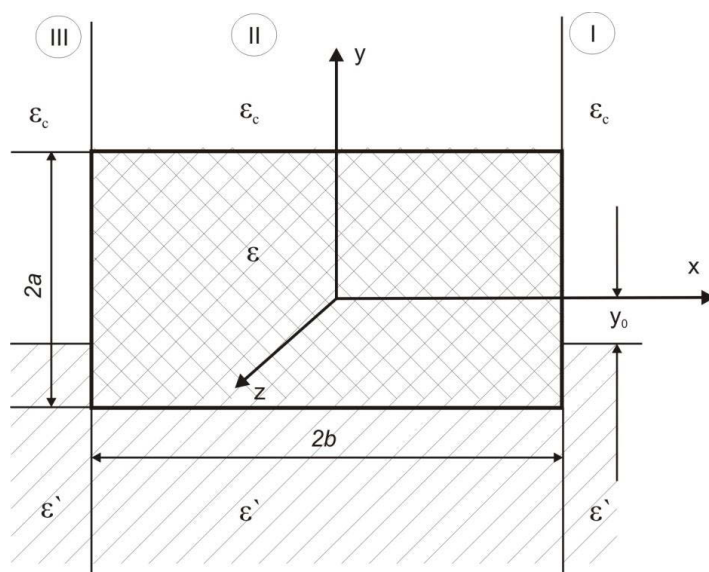
РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Основной интерес представляет решение данной задачи для произвольной ориентации главных осей тензора диэлектрической проницаемости относительно выбранной системы координат. Однако ее решение весьма затруднительно. Поэтому ограничимся частным случаем, когда анизотропный волновод характеризуется тензором диэлектрической проницаемости диагонального вида, у которого два элемента равны:

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_e & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

Предполагаем, что тензор диэлектрической проницаемости подложки имеет аналогичный вид:

$$\dot{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \dot{\varepsilon}_0 & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\varepsilon}_e & 0 \\ 0 & 0 & \dot{\varepsilon}_0 \end{pmatrix}. \quad (2)$$



Выберем декартову систему координат таким образом, чтобы ось волновода совпадала с координатной осью OZ , а в поперечной плоскости область, занимаемая стержнем, определялась неравенствами $|x| \leq b$, $|y| \leq a$ (Рис.1). Принимаем, что волновод внедрен в подложку на величину $(a + y_0)$.

Рис. 1.

Прямоугольный волновод, частично внедренный в подложку.

Предполагаем также, что среда над волноводом и подложкой - изотропный диэлектрик с диэлектрической проницаемостью ε_c . Следует отметить, что задача в такой постановке не решается известными методами [5-8]. Данная задача решается методом частичных областей в одноволновом приближении.

Разобьем плоскость поперечного сечения системы на три частичные области. Область *I* ограничена плоскостями $x = \pm b$ области *II* и *III* задаются соответственно неравенствами $x > b$ и $x < -b$. Решение уравнений Максвелла ищем в виде бегущих вдоль оси волновода гармонических волн [10-14]:

$$E = E(x, y) \exp(ihz - i\omega t), \quad H = H(x, y) \exp(ihz - i\omega t). \quad (3)$$

При этом поперечные составляющие поля во всех точках системы выражаются посредством дифференцирования через продольные составляющие E_z и H_z . Найдем распределение поля в областях *I—III*. С учетом симметрии системы относительно плоскости $x=0$ возможно существование двух независимых групп волн. Пренебрегаем процессом трансформации волн при отражении на гранях $x = \pm b$, т. е. поле в частичной области *I* приближенно представим одной модой плоского анизотропного волновода на анизотропной подложке. Граничным условиям при $y = \pm a$ удовлетворяют два типа независимых волн. Для первого типа, который определяется условием $E_y = 0$, выражения для продольных составляющих в области *I* имеют вид:

$$E_z(x,y) = A_0 \varphi_0(x,y), \quad H_z(x,y) = A_0 \varphi_0(x,y), \quad (4)$$

а волновые числа u_0 , ϑ_0 , q_2 и q_3 связаны с h_0 выражениям

$$k_0^2 \varepsilon_0 = u_0^2 + \vartheta_0^2 + h_0^2, \quad (5)$$

$$k_0^2 \dot{\varepsilon}_0 = u_0^2 + \vartheta_0^2 - q_3^2, \quad (6)$$

$$k_0^2 \varepsilon_e = u_0^2 + \vartheta_0^2 - q_3^2, \quad (7)$$

являющимися обычными уравнениями для постоянных распространения. При этом

ϑ_0 , q_2 и q_3 удовлетворяют уравнению

$$\operatorname{tg}(2\vartheta_0 a) = \vartheta_0(q_2 + q_3) / (\vartheta_0^2 + q_2 q_3), \quad (8)$$

которое аналогично характеристическому уравнению для обыкновенных волн плоского анизотропного волновода на анизотропной подложке.

Для второго типа волн с поляризацией $H_y = 0$ в области будем иметь

$$E_z(x,y) = B_e \varphi_e(x,y), \quad H_z(x,y) = B_e \varphi_e(x,y), \quad (9)$$

а волновые числа u_e , ϑ_e , $\dot{q}_2$ и $\dot{q}_3$ связаны с h_e выражениям

$$k_0^2 \varepsilon_0 \varepsilon_e = \varepsilon_e u_e^2 + \varepsilon_0(u_e^2 + h_e^2), \quad (10)$$

$$k_0^2 \dot{\varepsilon}_0 \dot{\varepsilon}_e = \dot{\varepsilon}_0(u_e^2 + h_e^2) - \dot{q}_3^2 \dot{\varepsilon}_e, \quad (11)$$

$$k_0^2 \varepsilon_e = u_e^2 + h_e^2 - \dot{q}_2^2, \quad (12)$$

соответствующими необыкновенным волнам. При этом ϑ_e , $\dot{q}_2$ и $\dot{q}_3$ удовлетворяют уравнению

$$\operatorname{tg}(2\vartheta_0 a) = \frac{\varepsilon_0 \vartheta_e (\dot{\varepsilon}_0 \dot{q}_2 + \varepsilon_e q_3)}{\varepsilon_0 \dot{\varepsilon}_0 \vartheta_0^2 + \varepsilon_0^2 \dot{q}_2 \dot{q}_3}, \quad (13)$$

подобному характеристическому уравнению для необыкновенных волн плоского анизотропного волновода на подложке.

Таким образом, волны (4) соответствуют обыкновенным волнам ($E_y = 0$), а (9) - необыкновенным волнам ($H_y = 0$) анизотропного прямоугольного диэлектрического волновода.

Во внешних областях II ($x > b$ и III ($x < -b$) поля представим в виде суперпозиции собственных волн системы, состоящей из двух сред, одна из которых имеет диэлектрическую проницаемость ε_e , а вторая характеризуется тензором диэлектрической проницаемости (2), разделенных плоской границей $y = y_0$.

Для обыкновенных волн с поляризацией $E_y = 0$ имеем (верхний знак соответствует области $x < -b$, а нижний области $x > b$):

$$\begin{aligned} E_z(x,y) &= \int_0^\infty \alpha_\pm(\lambda_1) F_1(\lambda_1, y) \exp[\pm \beta_1(x \pm b)] d\lambda_1 \\ &\quad + \int_0^\infty \gamma_\pm(\sigma_1) F_2(\sigma_2, y) \exp[\pm \beta_2(x \pm b)] d\sigma_2 \\ H_z(x,y) &= \int_0^\infty \frac{h}{\pm \beta_1 \kappa_0} \alpha_\pm(\lambda_1) E_1(\lambda_1, y) \exp[\pm \beta_1(x \pm b)] d\lambda_1 + \\ &\quad + \int_0^\infty \frac{h}{\pm \beta_2 \kappa_0} \gamma_\pm(\sigma_2, y) E_2(\sigma_2, y) \exp[\pm \beta_2(x \pm b)] d\sigma_2 \end{aligned} \quad (14)$$

Для необыкновенных волн с поляризацией $H_y = 0$ выражения для продольных составляющих полей аналогичны

$$\begin{aligned}
 H_z(x, y) &= \int_0^{\infty} c_{\pm}(\lambda_1) \bar{F}_1(\lambda_1, y) \exp[\pm \beta_1(x \pm b)] d\lambda_1 \\
 &\quad + \int_0^{\infty} d_{\pm}(\sigma_2) \bar{F}_2(\sigma_2, y) \exp[\pm \beta_2(x \pm b)] d\sigma_2 \\
 E_z(x, y) &= \int_0^{\infty} \frac{h}{\pm \beta_1 \kappa_0} c_{\pm}(\lambda_1) \bar{E}_1(\lambda_1, y) \exp[\pm \beta_1(x \pm b)] d\lambda_1 + \\
 &\quad + \int_0^{\infty} \frac{h}{\pm \beta_2 \kappa_0} d_{\pm}(\sigma_2) \bar{E}_2(\sigma_2, y) \exp[\pm \beta_2(x \pm b)] d\sigma_2
 \end{aligned} \tag{15}$$

В выражениях (15) нижний знак соответствует области II, а верхний - области III. При этом, если $e_c = e'_0 = e_e$ (среда в областях II и III однородна), выражения (14) и (15) преобразуются в интегралы Фурье по плоским волнам.

Амплитуды разложений $\alpha_{\pm}(\lambda_1)$ и $y_{\pm}(\lambda_2)$, $C_{\pm}(\sigma_1)$ и $d_{\pm}(\sigma_2)$ определяют электромагнитное поле в областях II и III для двух типов волн полоскового волновода и в зависимости от четности решения по x могут отличаться только знаком. Эти амплитуды, а также постоянная распространения h , определяющие поле полоскового волновода, находятся из условий согласования полей на границах $x = \pm b$. Вследствие симметрии системы относительно плоскости $x = 0$ достаточно учесть граничные условия лишь на одной поверхности $x = b$. Предположим, что отражение волн на гранях $x = \pm b$ происходит преимущественно без трансформации, т. е. поле в частичной области I имеет вид (4) или (9). При этом, как и прежде, составляющие поля H_z для волн (4) и E_z для волн (9) не учитываются. Тогда из согласования E_z компонент для обыкновенных волн (4) и H_z , составляющих для необыкновенных волн (9) на границе $x = b$ соответственно и из условий равенства H_y составляющих для обыкновенных волн (4) и E_y составляющих для необыкновенных волн получим характеристические уравнения для нахождения постоянной распространения для двух типов волн полоскового волновода

$$\begin{aligned}
 &\frac{-ctg(ub)}{tg(ub)} \left\{ \frac{u^2 + h^2}{u} \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi_e(b, y)|^2 dy \right. \\
 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\lambda_1^2 - k_0^2 \varepsilon_e}{\beta_1} * \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_e(b, y) \bar{F}_1(\lambda_1, y) dy \right|^2 d\lambda_1 \\
 &\quad + \int_0^{\infty} \frac{\sigma_2^2 - k_0^2 \varepsilon_0}{\beta_2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_0(b, y) \bar{F}_2(\sigma_2, y) dy \right|^2 d\sigma_2
 \end{aligned} \tag{16}$$

(обыкновенные волны),

$$\begin{aligned}
 &\frac{-tg(ub)}{ctg(ub)} \left\{ \frac{u^2 + h^2}{u} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{1}{\sqrt{\varepsilon(y)}} \varphi_e(b, y) \right|^2 dy \right. \\
 &= \int_0^{\infty} \frac{k_0^2 \varepsilon_e - \lambda_1^2}{\beta_1} * \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_e(b, y) \bar{F}_1(\lambda_1, y) dy \right|^2 d\lambda_1 \\
 &\quad + \frac{\varepsilon_e}{\varepsilon_0} \int_0^{\infty} \frac{k_0^2 \varepsilon_0 - \sigma_2^2}{\beta_2} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_e(b, y) \bar{F}_2(\sigma_2, y) dy \right|^2 d\sigma_2
 \end{aligned} \tag{17}$$

(необыкновенные волны).

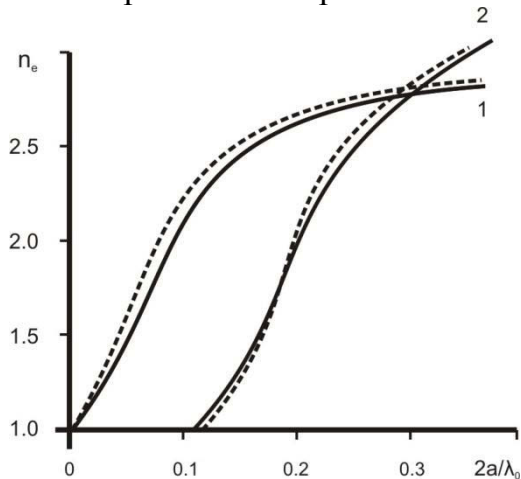
При этом интегралы по y в выражениях (16) и (17) легко берутся в явном виде при любых $|y_0| \leq a$. Кроме очевидного перехода к изотропным средам, полученное решение задачи содержит ряд других частных случаев. Приравнявая диэлектрические проницаемости подложки и окружающей среды, получаем результат для волновода в однородной среде. Если же приравнять проницаемости подложки и окружающей среды лишь в боковых областях II и III ($|x| > b$), то получится результат для прямоугольного волновода на подставке.

СРАВНЕНИЕ ТЕОРИИ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

В работе сделаны численные расчеты характеристических уравнений, полученных для анизотропного волновода с однородным окружением и для анизотропного полоскового волновода, которые исследовались экспериментально в СВЧ диапазоне. Сопоставление теоретических и экспериментальных результатов позволило установить границы применимости принятого метода расчета. Для обеспечения надежности полученных результатов экспериментальные исследования проводились в миллиметровом ($6 \div 16$ мм) диапазоне длин волн, методика измерений для которых хорошо разработана и позволяет достаточно точно контролировать форму и размеры волноводов.

Образцы из исследуемого материала помещались в открытый резонатор Фабри—Перо, образованный сетчатым отражателем и медным зеркалом. Возбуждение нужного типа колебаний в резонаторе производилось через сетчатый отражатель с помощью диэлектрического волновода, который одновременно использовался для индикации резонанса. Исползованная аппаратура (клистронные генератор, гетеродинным частотомер) обеспечивает измерение волноводного показателя преломления с точностью до 1%.

При этом измеренные значения отличаются от теоретических лишь в третьем



знаке после запятой, т. е. они совпадают в пределах точности эксперимента. Из Рис.2 видно, что для обыкновенной волны (кривая 1) и для необыкновенной волны (кривая 2) - отклонение теории от эксперимента не превышает 1%.

Рис. 2.

Теоретические и экспериментальные данные для двух основных типов волн волновода на подложке из фторопласта-4

Кривая 1 - обыкновенная волна, Кривая 2 — необыкновенная волна.

Сплошная линия — теоритический расчет, пунктирная линия - эксперимент

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, сопоставление теоретических и экспериментальных данных показывает, что одноволновое приближение достаточно точно описывает основные типы прямоугольных анизотропных волноводов. Причем точность метода растет с увеличением отношения боковых сторон волноводов.

1. W.Schlosser, *Der rechteckige dielektrische Draht*, Arch. Elekt. Ubertz., **18** №7 (1964) 403-408.
2. M.Matsuhara, *Analysis of TEM modes in dielectric waveguides by a variation*

- method, JOSA, 63* (1973) 1514—1517.
3. T.Itoh, *Numerical techniques for microwave and millimeter wave passive structures*, New York: Wiley, (1989) 720.
 4. Н.Н.Войтович, Б.З.Каценеленбаум, А.Н.Сивов, А.Д.Шатров, *Собственные волны диэлектрических волноводов сложного сечения (обзор)*, *Радиотехника и электроника*, **24** (1979) 1245-1263.
 5. J.E.Goell *A circular harmonic computer analysis of rectangular dielectric waveguide*, *B. S. T. J.*, **48** (1969) 2133-2160.
 6. E.A.J.Marcatili, *Dielectric rectangular waveguide and directional coupler for integrated optica*, *B. S. T. J.*, **48** (1969) 2071.
 7. *Integrated circuits for the millimeter through optical frequency range*, *Proc. of Symp. Submil. Waves. Brooklyn*, (1970) 497-506.
 8. V. Ramaswamy, *Strip-loaded film waveguide*, *B. S. T. J.*, **53** (1974) 697-704.
 9. G.G.Liang, Y.W.Liu, K.K.Mei, *Full-wave analysies of complanar wave GUIDE*, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, **37** (1989) 1949-1957.
 10. M.A.Solano, A.Vegas and A.Prieto, *Numerical analysis of discontinuities in a rectangular waveguide loaded with isotropic or anisotropic obstacles by means of the coupled-mode method and the mode-matching method. International Journal of Numerical Modelling*, **VII** (1994) 433—452.
 11. D.M.Sheen, S.M.Ali, M.D.Abouzahra, J.A.Kong, *Application of the 3D trinity difference timedomane metod analysies of planar microstrip circuits*, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.* **38** (1990) 849-851.

QİSMƏN ANİZOTROP ALTLIĞA YERLƏŞDİRİLƏN DÜZBUCAQLI ANİZOTROP DALĞAÖTÜRÜCÜSÜNÜN MODELƏŞDİRİLMƏSİ

İ.C.İSLAMOV, M.B.CƏFƏRZADƏ

Difraksiya nəzərə alınmaqla, qismən anizotrop altlığa yerləşdirilən düzbucaqlı anizotrop dalğaötürən modelləşdirilməsi məsələləri hazırlanmışdır. Anizotrop dalğaötürəninin ədədi hesablanması aparılmışdır. İYT diapazonda anizotrop dalğaötürəninin təcrübi tədqiqi aparılmışdır. Nəzəri və təcrübi nəticələrin müqayisəsi göstərir ki, bir dalğalı yaxınlaşma düzbucaqlı anizotrop dalğaların əsas tiplərini dəqiq xarakterizə edir.

MODELLING OF THE ANISOTROPIC RECTANGULAR WAVEGUIDE, PARTIALLY LOADED IN THE ANISOTROPIC SUBSTRATE

I.J.ISLAMOV, M.B.JAFARZADE

The modeling of the anisotropic rectangular waveguide, partially introduced in an anisotropic substrate has been considered with diffractions on account. Numerical calculations of the anisotropic waveguide have been carried out. The rectangular anisotropic waveguide has been experimentally investigated in the microwave range. Comparison of the theoretical and experimental data has demonstrated that one-wave approach precisely enough describes the basic types of rectangular anisotropic wave guides.

Редактор: И.Мамедов

УДК 524.4

ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРА И БЛЕСКА RY TAU

**Н.З.ИСМАИЛОВ^{1,2}, П.Н.ШУСТАРЕВ², Б.Н.РУСТАМОВ²,
А.Н.АДЫГЕЗАЛЗАДЕ¹**

Бакинский Государственный Университет¹

AZ 1148, г. Баку, ул. З.Халилова 23

Шамахинская Астрофизическая Обсерватория НАН Азербайджана²

AZ 5624, г. Баку, ул. Ю.Мамедалиева

ismailovn@yahoo.com

поступила 29.04.2011
принята к печати 20.06.2011

Ключевые слова: околозвездная материя, нестационарность, RY Tau.

РЕФЕРАТ

По двум сериям квазисинхронных фотометрических и УФ-спектральных наблюдений показано, что при монотонном увеличении и ослаблении блеска наблюдается неоднозначное изменение интенсивности эмиссии. Впервые обнаружена периодическая переменность интенсивности эмиссии с периодом 23 дня. Кривая РЭС показала, что излучение звезды является комбинированным, и это излучение можно представить тепловым излучением тел с разными температурами. Спектральный Фурье-анализ блеска выявил вероятные периоды 14 лет и 6 лет.

ВВЕДЕНИЕ

RY Tau (HD 283571, $V=10.^m3$) является одной из классических звезд типа Т Тельца (CTTS), которая впервые была приведена в оригинальном списке Джоя [1] как одна из 11 звезд с эмиссионными линиями, подобными линиям солнечной хромосферы. Спектральный класс звезды определен как K1e IV–V (Li) [8] и K1 [3], а позже как G2 [4] и G1-2IV-V [5]. Звезда имеет слабую степень вуалирования в видимой области спектра [4], а в фиолетовой части вуалирование не наблюдается [7]. Эквивалентная ширина линии H α около 20 Å, а линия H β находится либо частично в эмиссии, либо в абсорбции [8]. Профиль линии H α показывает изменение за сутки, имеется абсорбция в красном или фиолетовом крыле линии (см., например, [10, 9, 8]). По данным разных авторов, сведения об изменении потока в линии H α с изменением блеска противоречивы [5].

Петров и др. [5] приводят результаты комплексных наблюдений звезды при увеличении ее блеска в 1996 г. Авторы показали, что основной причиной переменности RY Tau может быть затмение звезды околозвездными газово-пылевыми облаками. Первые исследования УФ-спектра показали присутствие слабой эмиссии в линиях FeII [11]. В работе [12] показано, что при ослаблении блеска в V -полосе от 9.^m9 до 10.^m8 структура линии MgII $\lambda 2800$ Å переходит от абсорбции к эмиссии. На основании анализа УФ- спектра звезды Ламзин [13] показал, что эмиссионные линии RY Tau не могут образовываться в гидростатические равновесной хромосфере, а причиной их образования является аккреция из околозвездного вещества.

Звезда является относительно быстрым ротатором $v \sin i = 51.6$ км/с [14] и показывает частые затмения подобно звездам типа UX Ori [8, 5]. Звезда давно заподозрено в двойственности [2], а в работе [15] последним данным Hipparcos на минимальном расстоянии около 3 а.е. в позиции $314^\circ \pm 34^\circ$ был обнаружен второй компонент системы.

Из анализа фотографических данных 1900–1955 гг. было выявлено два типа изменений блеска звезды: 1) переменность с характерным временем около 10 лет и

амплитудой 2^m-3^m ; 2) переменность с характерным временем около года с амплитудой до 1^m [16]. После необычного увеличения блеска в V -полосе от 11^m до 9^m в 1983–1984 гг. [17, 9], интерес к фотометрическим и спектральным исследованиям этой звезды значительно возрос. Анализы кривой блеска звезды, проведенные разными авторами с целью обнаружения периодической составляющей блеска не приводили к положительному результату. Так, в наблюдениях Хербста и др. [18] обнаружены фотометрические периоды 5.6 суток (с достоверностью всего 10%) и 66 суток. В последующей работе [19] показано, что из-за частых иррегулярных изменений блеска звезды существование этих периодов по фотоэлектрическим наблюдениям не подтверждается.

По результатам фотометрических наблюдений 1985-1986 гг. в [20] было подтверждено существование периода 5.6 и 7.25 дней. Недавно, при поиске долговременных и кратковременных периодических изменений Зайцева [21] провела анализ 30-летней UBV- кривой блеска по данным, полученным за 1965-2000 гг. В этой работе было подтверждено существование 2000-дневного долговременного цикла, который был выявлен ранее по результатам фотографических наблюдений [22]. В работе [21] подтверждается существование также периода 7.5 дней, но не выявляется период 5.6 дней, что автор объясняет изменением фазы периода. В работе [23] показано, что в 1983–2004 гг. изменения блеска звезды носили циклический характер. Частотный анализ позволяет выделить периоды 377 ± 10 и 146 ± 3 суток. Статистический анализ распределения блеска показал, что переменность блеска невозможно описать нормальным распределением. Кривую распределения энергии в спектре звезды в первом приближении можно представить комбинированным излучением тел с температурами 6000 K, 3000 K и 90 K.

По данным [24], распределение энергии в спектре (РЭС) RY Tau имеет плоскую форму в ИК-диапазоне. Имеется также сильный избыток в миллиметровом континууме [25].

Целью настоящей работы является анализ результатов спектральных наблюдений в УФ и оптической части спектра и проведения спектрального Фурье анализа кривой блеска звезды.

10-ЛЕТНИЙ МОНИТОРИНГ УФ СПЕКТРА И БЛЕСКА

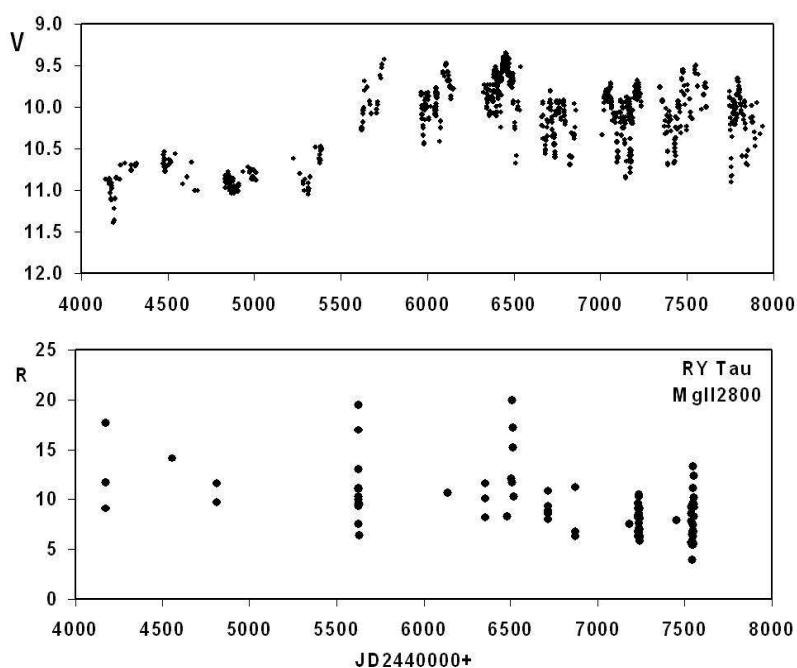
В архиве IUE имеются спектры, которые были получены с помощью трех камер; первая из них охватывает диапазон 1175-2000 Å (Short Wavelength Prime - SWP), вторая и третья – 2000-3200 Å (Long Wavelength Prime – LWP и Long Wavelength Redundant - LWR). Спектральное разрешение составляет около 6Å. Такие спектрограммы нами были использованы для изучения временных изменений в спектре звезды. О методике обработки этих спектрограмм подробно изложено в работе Исмаилова и др. [26]. Для RY Tau нами было обработано 15 спектрограмм SWP и 86 спектрограмм типа LWP и LWR, полученных в 1979–1990 гг.

Во избежание учета межзвездного покраснения в эмиссионных линиях спектра мы применяли классический метод обработки спектрограмм, в котором измерение производится в относительных единицах: после проведения уровня непрерывного спектра определялись центральные глубины ($R_\lambda = 1 - \frac{I}{I_0}$) и полуширины ($\Delta\lambda_{1/2} - \text{FWHM}$) линий или бленд. Здесь I – абсолютный поток при вершине линии, I_0 – абсолютный поток на уровне континуума при основании линии. В таком измерении основная ошибка при измерении интенсивности линии возникает из-за неправильного проведения уровня непрерывного спектра. Поэтому, процедуру

проведения непрерывного спектра мы выполняли очень тщательно, добиваясь постоянства проведения континуума через отдельные участки спектра. Центральные глубины линии R_λ измерялись ошибкой не хуже 5%. Так как полуширины линий $\Delta\lambda_{1/2}$ определяются с ошибкой $\pm 1.5\text{\AA}$ (для SWP камеры) и $\pm 3\text{\AA}$ (для LWP и LWR камер), вычисленные по этим параметрам эквивалентные ширины также дают большую ошибку измерений – до 15÷20%. Так как из-за низкого разрешения эквивалентные ширины определяются с относительно большой ошибкой, для дальнейшего анализа мы использовали глубины линий R_λ . Вычисленные значения R_λ для эмиссионных линий являются отрицательными. Для удобства на рисунках знак минус намеренно не приводится.

Нами были измерены центральные глубины и полуширины наиболее сильных эмиссионных линий. Среди наиболее сильных эмиссионных линий в области λ 2000÷3000Å имеются линии дублета $MgII$ $\lambda\lambda$ 2795, 2802Å. Параметры этого дублета уверенно измерены по всем спектрограммам. Из-за низкой дисперсии этот дублет наблюдается как одна сильная эмиссия – $MgII$ λ 2800Å. Результат измерений по дублету $MgII$ λ 2800Å составил 86 точек, и это является наибольшим массивом среди измеряемых линий. В настоящей работе приводим результаты анализа этого дублета.

На Рис.1 в верхней панели приведена V -кривая блеска звезды, взятая из архива [27], а на нижней панели приведена временная зависимость интенсивности R_λ для всего интервала наблюдений. Значения R_λ являются отрицательными для эмиссионной линии, но на рис.1 и на последующих рисунках мы для простоты приводим модуль значений этого параметра. Как отсюда видно, несмотря на то, что

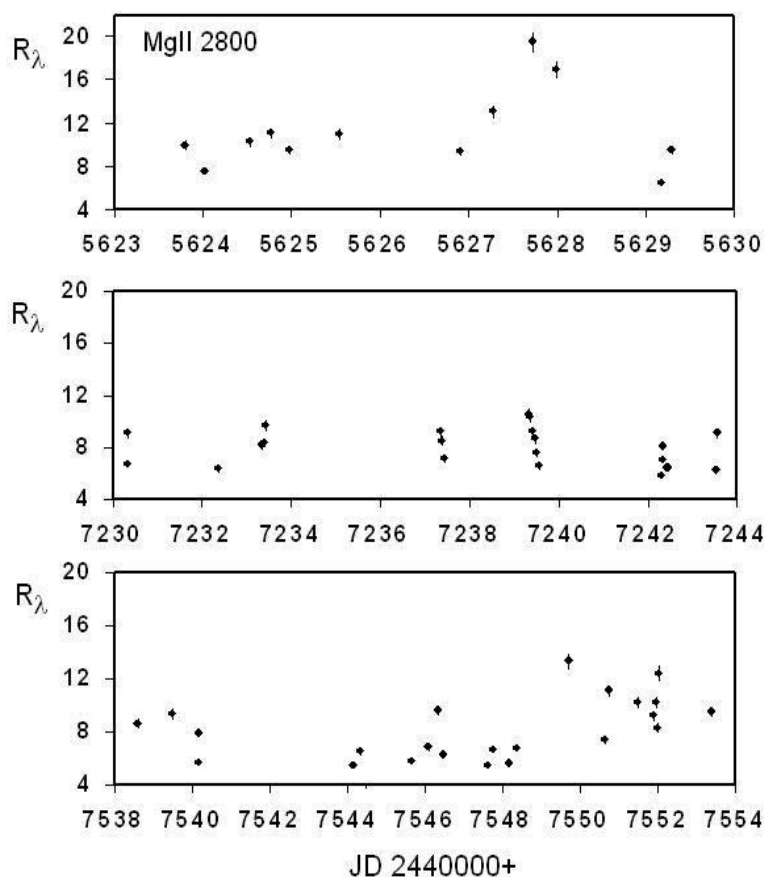


кривая блеска хорошо демонстрирует увеличение активности в 1983-1984 гг., эмиссия дублета $MgII$ λ 2800 Å не показала однозначную связь с этим событием. Изменение интенсивности линии носит в целом иррегулярный характер, что является характерным для большинства звезд типа Т Тельца.

Рис.1

Зависимость V -значений блеска RY Тау (вверху) и переменность глубины (интенсивности) линии $MgII$ λ 2800Å в промежутке времени 2444000-2448000.

Рассматриваемый спектральный материал в отдельные промежутки времени был получен с более плотным временным рядом. Это позволяет проследить быструю переменность эмиссионного спектра звезды. На Рис.2 нами приведены три более плотные по времени отдельные фрагменты из интервала наблюдений. Первый фрагмент был получен в 1983 г. (JD 2445623-2445630, данные [17, 28]). Это тот период времени, когда наблюдается увеличение блеска в 1983 гг. (рис.1). В этом промежутке времени наблюдаются отдельные всплески вспышечного характера – увеличиваются интенсивности линий примерно в 3 раза.



Второй фрагмент был получен в 1988 г. (JD 2447224-2447244, данные [21, 27]), т.е. уже после события 1983 г., а третий фрагмент - в 1989 г. (JD 2447538-2447554, данные [27]). Интересно, что все три фрагмента, по характеру переменности и по амплитуде переменности, отличаются друг от друга. К наиболее активному состоянию можно отнести первый, а к наиболее спокойному - второй интервал времени. Эти результаты показали, что наблюдается также быстрая переменность интенсивности линии от ночи к ночи.

Рис.2.

Суточная переменность глубины дублета $MgII\ 2800\ \text{\AA}$ в трех разных фрагментах.

На Рис.3 приводится зависимость блеска и интенсивности эмиссионного дублета $MgII\ 2800\ \text{\AA}$ для вышеуказанных временных интервалов.

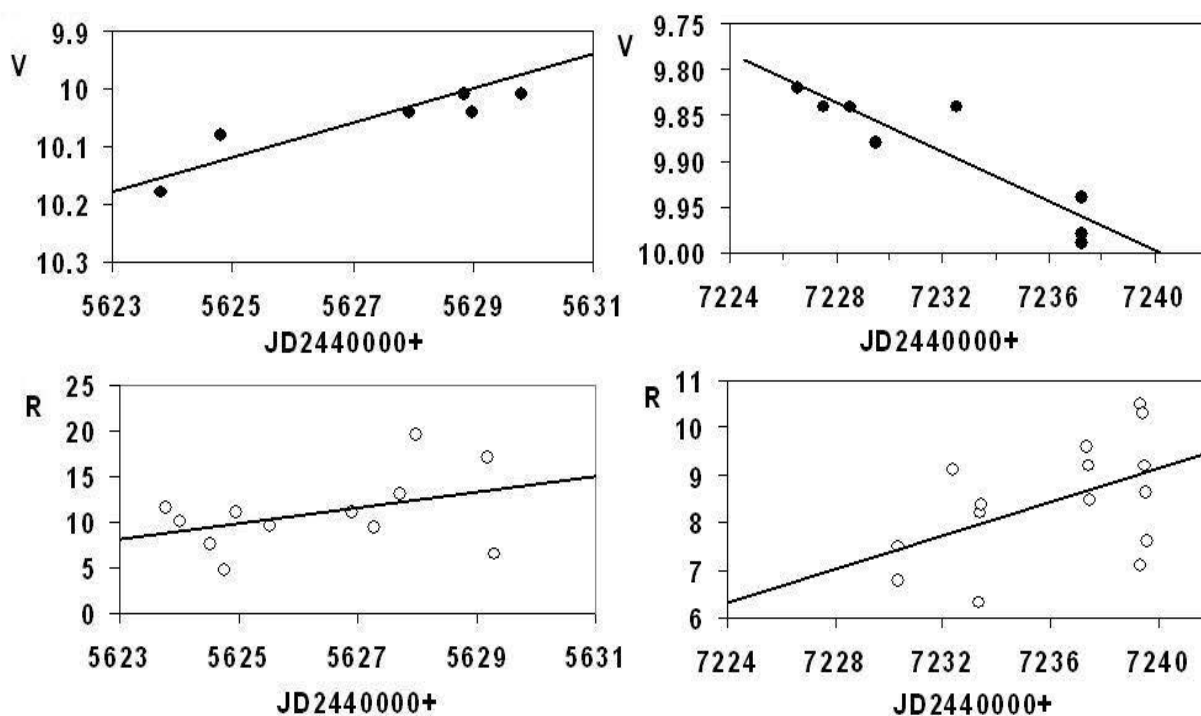


Рис.3.

Изменение блеска и интенсивности линии $MgII\ 2800\ \text{\AA}$ для разных временных интервалов. Линии проведены линейным полиномом.

Как видно из Рис.3, в JD 2445623-2445630 наблюдается монотонное увеличение блеска на $\Delta V=0.2^m$, в то время как, среднее значение интенсивности линии увеличивается более чем в 2 раза. При JD 2447224-2447244 наблюдается уменьшение блеска на $\Delta V=0.2^m$, когда интенсивность спектральной линии монотонно растет примерно в два раза. В интервале JD 2447538-2447554 наблюдается быстрая иррегулярная переменность блеска и интенсивности линии без какой-либо закономерности.

Изменение V -значений блеска в указанные промежутки времени равны примерно $0.^m2$, что соответствует изменению излучения в континууме около 1.2 раза. Однако излучение в эмиссионной линии изменяется в два раза. Это показывает, что механизм изменения блеска и эмиссионного спектра отличаются.

Полученный массив центральных глубин дублета $MgII \lambda 2800\text{\AA}$ был обработан методом Скаргла [29] на предмет периодичности. В периодограмме нами получено 5 наиболее значимых частот с достоверностью более 90% в интервале периодов $2\div 300$ дней. Свертки показали, что наиболее удовлетворительную картину периодичности можно получить по фазам периода $P=23.26\pm 0.06$ дней. Среди найденных наиболее вероятных периодов привлекает внимание и менее значимый период 7.8^d , напоминающий период 7.25^d , полученный по анализу кривой блеска звезды [25, 26]. Однако степень значимости последнего периода по спектральным данным является невысокий. Заметим, что по данным Зайцевой [21] анализ кривой блеска дает близкие к 23.26 дней значения изменения блеска с периодами 20 и 29 дней.

На Рис.4. приведена фазовая кривая изменения интенсивности линии $MgII \lambda 2800\text{\AA}$ по всем измерениям. Как видно, наблюдается удовлетворительная картина периодичности.

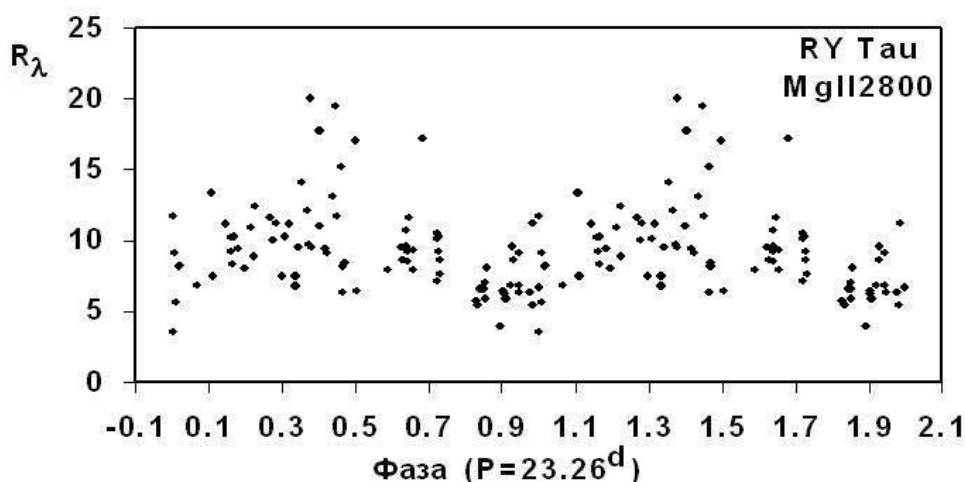


Рис.4.

Фазовая кривая интенсивности эмиссионного дублета $MgII \lambda 2800\text{\AA}$.

Наши измерения показали, что существует группа эмиссионных линий, интенсивности которых также меняются с фазой определенного периода. Мы проверили изменение с фазой периода 23.26 дней для интенсивностей 15 разных эмиссионных линий. Анализ показал, что, например, для линии $HeII \lambda 1640\text{\AA}$, $CIV \lambda 1756\text{\AA}$, $SII \lambda 1756\text{\AA}$ при фазах $0.4-0.5P$ наблюдается периодическое увеличение интенсивности. Интересно, что фазовая кривая интенсивности для полузапрещенных линий $SiIII] \lambda 1892\text{\AA}$ и $CIII] \lambda 1908\text{\AA}$ показала уменьшение интенсивности в этой фазе. О физическом происхождении этих линий в УФ

спектре звезд типа Т Тельца было сообщено в работе [30]. На Рис.5 приведен пример изменения интенсивностей указанных линий с фазой этого периода.

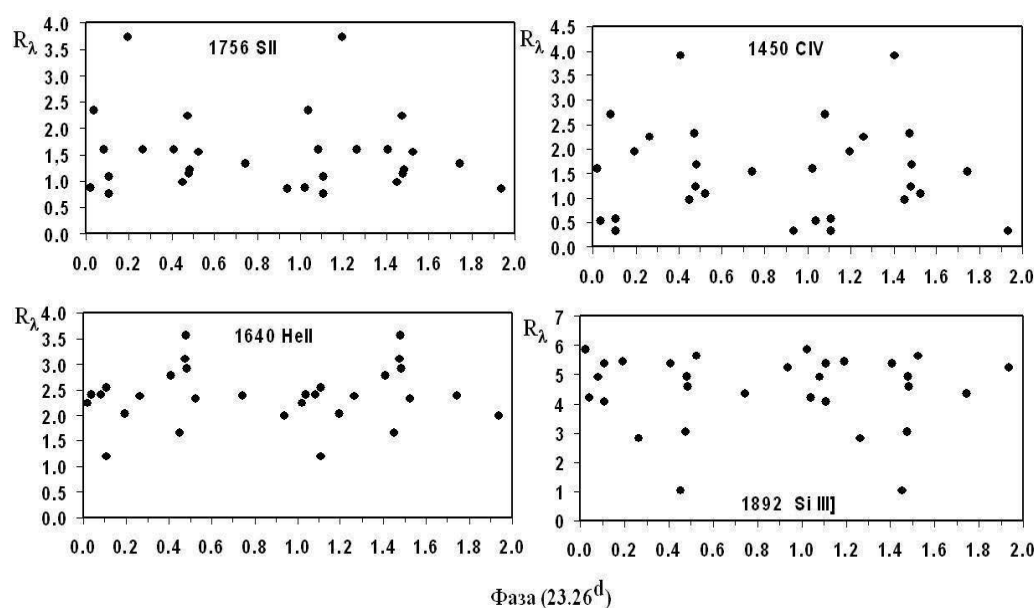


Рис.5.

Изменение интенсивностей некоторых линий с фазой периода 23.26 дней.

СПЕКТР В ОПТИЧЕСКОМ ДИАПАЗОНЕ

Спектры звезды были получены на Кассегреновском фокусе 2м телескопа с применением штатного дифракционного спектрографа с дисперсией $75 \text{ \AA}/\text{мм}$. Применялись пластинки Kodak103aO (для синей части) и 103aF и пленки A700 (для участка линии $H\alpha$). Спектрограммы получены З.А.Исмаиловым в отдельные сезоны 1975, 1984 и 1985 гг. Диапазон наблюдений $\lambda 3600 \div 5100 \text{ \AA}$ и $\lambda 5100 \div 6700 \text{ \AA}$, спектральное разрешение около $3 \text{ \AA}$. Спектры обрабатывались стандартным методом. Средняя ошибка позиционных измерений составляет $\pm 15 \text{ км/с}$, а в эквивалентных ширинах, около $15 \div 20\%$. Основная часть результатов измерений по линии $H\alpha$ было опубликовано в работе [8]. В настоящей работе мы использовали эти результаты для анализа на предмет периодичности. Наблюдения в оптическом диапазоне по времени охватывают второй сезон после вспышки 1983/1984 гг., когда блеск звезды внезапно был увеличен от 11^m до 9^m в V- полосе [17, 9].

Линия $H\alpha$ имеет двухкомпонентную структуру с центральным провалом. Профиль и спектральные параметры линии показали значительную переменность по разным датам. В Таблице1, приведенной в работе [8], даны суммарные значения эквивалентных ширин W_λ компонент эмиссии $H\alpha$, лучевые скорости по отдельным компонентам V_B (фиолетовая), V_a (центральная абсорбция), V_R (красная), а также отношение центральной глубины фиолетового компонента к красному I_B/I_R .

Результаты измерений лучевых скоростей показали, что красная компонента линии $H\alpha$ не показала значительных изменений лучевых скоростей, в то время как компоненты V_B , V_a показали смещение на 200 и 100 км/с, соответственно.

На Рис.6 в верхней панели мы приводим зависимость лучевых скоростей отдельных компонент линии $H\alpha$ от фазы периода 23.26 дней. Как видно, получена удовлетворительная картина периодического изменения синего V_B и центрального V_a компонент линии $H\alpha$. На нижней панели Рис.6 приведена зависимость I_B/I_R от фазы того же периода. Как видно, минимумы значений лучевых скоростей

соответствуют фазе $0.4P$, в то время как минимумы относительных интенсивностей компонент соответствуют фазе $0.25P$. Сплошные кривые на Рис.6 проведены полиномом 6 степени.

В Таблице 1 приведены неопубликованные к настоящему времени результаты измерений эквивалентных ширин спектральных линий H_{β} - H_{δ} , $H+H_{\epsilon}$, K $CaII$. Измерения спектрограмм показали, что эмиссии в линиях H_{β} - H_{δ} в явном виде не наблюдается, и все эти линии наблюдаются в абсорбции. В отдельные ночи при повышении вклада эмиссии линия H_{β} полностью «заливается» эмиссией до уровня континуума. В то же время, линии $H+H_{\epsilon}$ и K $CaII$ наблюдаются в эмиссии.

Полученные значения эквивалентных ширин линий H_{β} , H_{γ} , H_{δ} , а также эмиссионных линий $H+H_{\epsilon}$, K $CaII$ были свернуты с найденным периодом 23.26 дней. На Рис.7 приведены фазовые кривые эквивалентных ширин линий H_{γ} , H_{δ} , $H+H_{\epsilon}$ и K $CaII$. Из этих данных следует, что только эмиссионные линии H и K $CaII$ показали определенное увеличение интенсивностей при фазе $0.4P$. В целом, по всем линиям сохраняется тенденция к увеличению эквивалентных ширин при фазе $0.4P$. Это говорит о том, что изменения в оптическом диапазоне сопровождаются с аналогичным изменением УФ спектра, причем максимумы интенсивностей в оптическом диапазоне показали отставание по фазе найденного периода на $\sim 0.1P$. Сплошные кривые были проведены полиномом 6 степени.

Таблица 1.

Эквивалентные ширины спектральных линий RY Tau в оптическом диапазоне.

№ Sp	JD2440000+	H_{β} (abs.)	H_{γ} (abs.)	H_{δ} (abs.)	$H+H_{\epsilon}$ (em.)	K $CaII$ (em.)
1	2415.26		3.8	3.2		3.7
2	2416.30		4.3	2.8	1.7	4.2
3	2416.32		4.1	3.3	1.9	7.3
4	2416.36		3.1	2.8	2.6	4.9
5	6029.35	4.4	3.4	3	2.1	
6	6029.49	5		2.5		
7	6031.27	3.5	4.1	2.9		
8	6031.35	3.8	3	1.7		
9	6031.38	3	3.4	1.9		
10	6045.26		3	2.2	1.8	3.1
11	6047.24	3.1	3.9	2.9		
12	6049.20	2	3	2.5	1.1	2.1
13	6048.34		2.6	2	0.5	2.7
14	6084.47	2	3.2			
15	6110.27	1.8	3.4	2.8	0.7	2.3
16	6332.49	1.7	4	2.6	1.6	2.9
17	6331.56	1.9	3.9	2.8	1.4	2.7
18	6332.51	2.5	4	2.6	1	2.5
19	6331.51	1.7	4.2	2.6	0.7	1.5

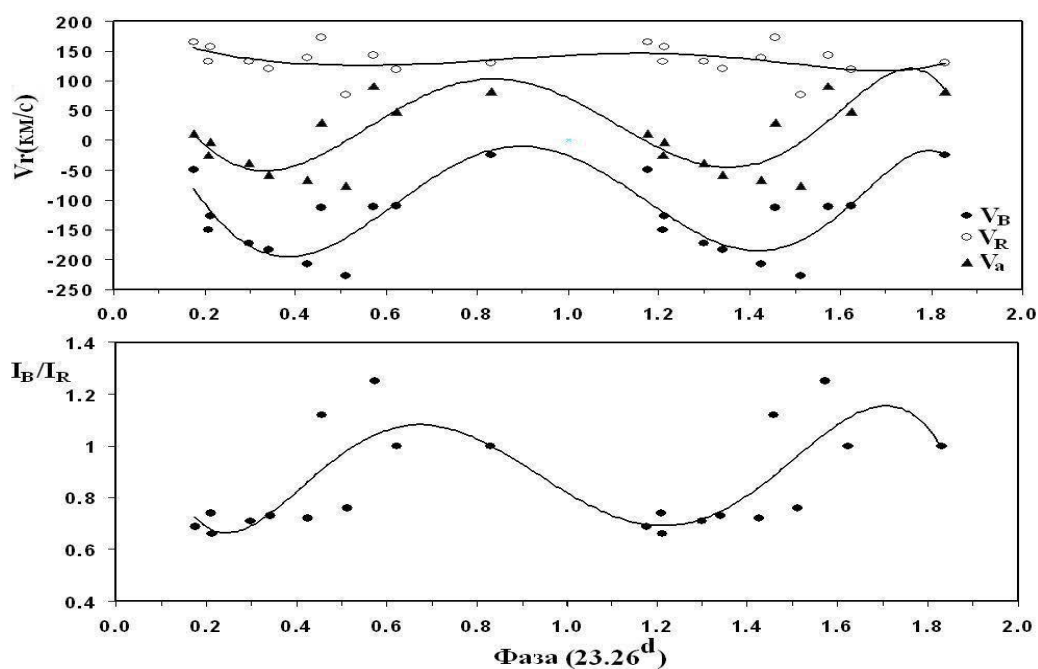


Рис.6.

Фазовые кривые лучевых скоростей отдельных компонент линии Na (верхняя панель) и относительной интенсивности эмиссионных компонент I_B/I_R (нижняя панель). Сплошные кривые проведены полиномом 6 степени.

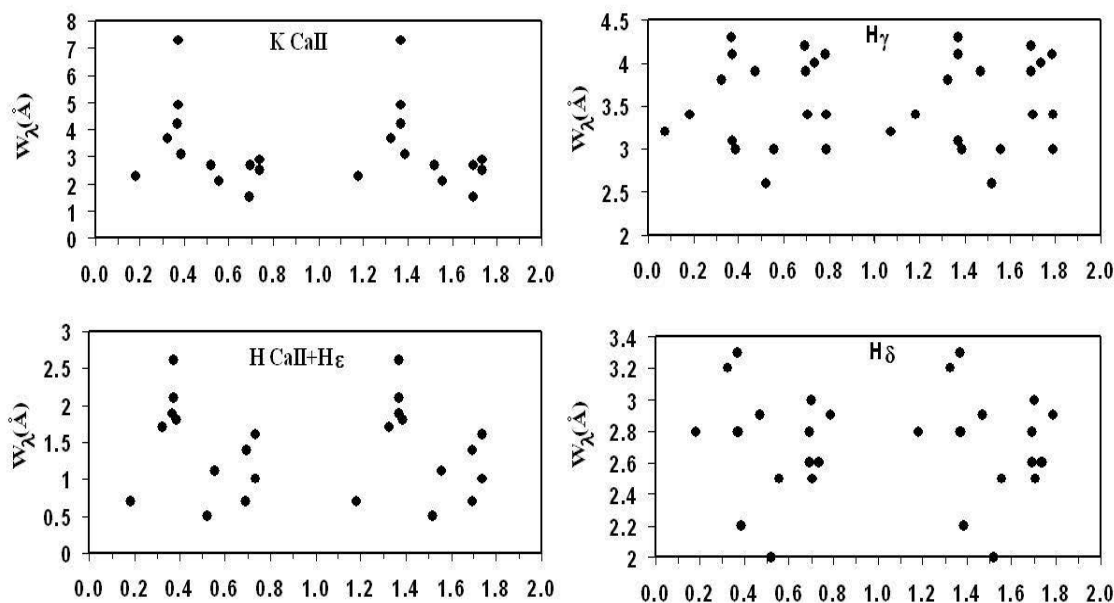


Рис.7.

Фазовые кривые зависимость эквивалентных ширин линий $H\gamma$, $H\delta$, $H+H\epsilon$, $K\ CaII$ от фазы периода 23.26 дней.

Таким образом, спектральные наблюдения в оптическом диапазоне показали, что эмиссионный спектр в оптическом диапазоне можно описать периодом, найденным по изменению эмиссионного дублета $MgII\ 2800\ \text{\AA}$ УФ спектру звезды.

СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ КРИВОЙ БЛЕСКА

Как нами было предположено в [23], что скорее всего RY Tau звездная система состоит, по крайней мере, из трех тел разной температуры. Кривая РЭС подтверждает существование комбинированного излучения в системе RY Tau. Для проверки этих предположений и выяснения причины многолетних изменений блеска звезды мы построили среднегодовую кривую блеска. Для спектрального анализа кривой блеска звезды мы собрали все фотоэлектрические *UBV* измерения, опубликованные в литературе и доступных в архивах [27, 31]. Всего было собрано около 1800 измерений *V*, и немного меньше в других полосах, охватывающих период наблюдений 1965÷2004гг. Массивы данных обрабатывались методом спектрального анализа с помощью программы STATISTIKA-6.0. Это высокотехнологичная программа, основанная на СОМ-архитектуре, она обладает разными функциональными и пользовательскими возможностями. Алгоритм классического статистического анализа для этой программы был разработан в 1965г.[32], а затем был усовершенствован разными авторами (см. например, [33, 34]).

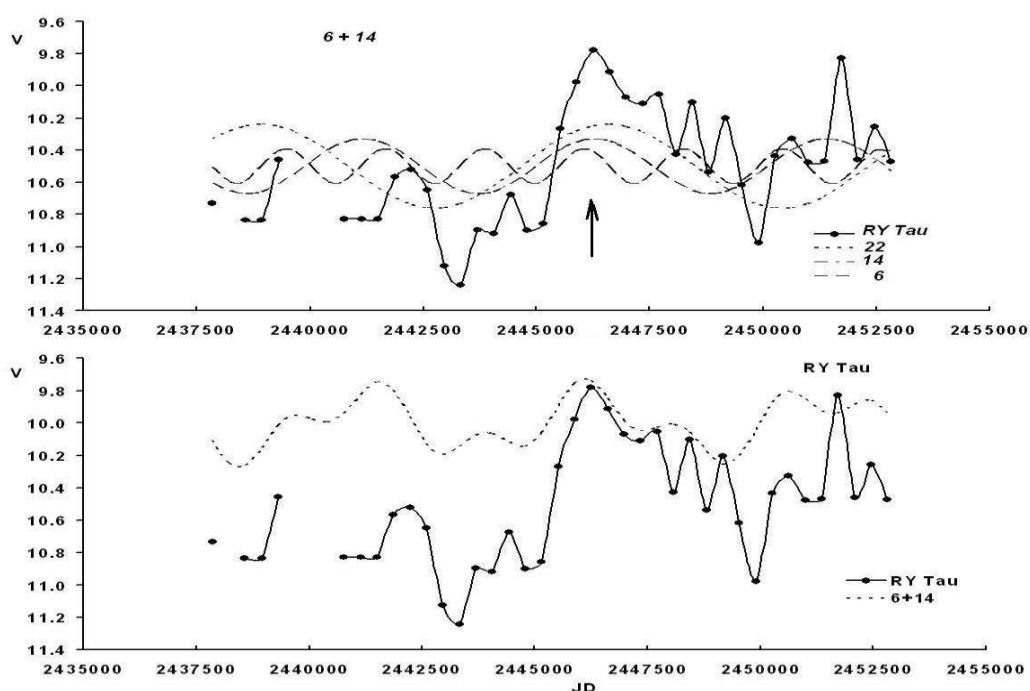


Рис.8.

В верхней панели - наблюдаемая среднегодовая кривая блеска RY Tau и Фурье кривые, в нижней панели — наблюдаемая кривая блеска звезды (сплошная кривая) и суммарная Фурье кривая (пунктир) для периодов 14+6 лет. Метод

ом, подробно описанным в нашей работе [35], мы проанализировали кривую блеска звезды RY Tau. Фурье-кривые были построены как для отдельных колор-индексов *U-B* и *B-V*, так и для *V*-значений блеска. Для уменьшения ложных периодов, получение которых является неизбежным в данном методе, фотометрические данные нами были усреднены по годам, поэтому формальная ошибка определения периода не меньше 1 года. Отбор полученных фурье-кривых основывался на значении параметра P_k (в дальнейшем достоверность), который можно интерпретировать как дисперсию данных на k -ой частоте (спектр мощности), и который вычисляется по формуле:

$$P_k = (a_k^2 + b_k^2)N/2,$$

где a_k и b_k - коэффициенты при синусе и косинусе в фурье-разложении, соответственно, N - число наблюдательных точек. Соответственно, чем больше

значение P_k , тем меньше различается фурье-кривая рассматриваемого периода и исходные данные.

Вычислялась фурье-кривая для наиболее достоверного периода и ее соответствующие значения вычитались из данных исходного массива. Полученная разностная кривая вновь подвергалась спектральному анализу. Описанный метод помогает выявлять случаи, когда в исходном массиве мы имеем несколько периодических составляющих одного и того же периода, но сдвинутых по фазе. Параллельно, для контроля над достоверностью получаемых периодических составляющих, мы каждый раз вычисляли коэффициенты корреляции между получаемыми разностными кривыми и соответствующими фурье-кривыми. Значения коэффициентов корреляции при этом монотонно уменьшаются с каждым очередным вычитанием. Значения коэффициентов корреляции вычислялись нами как параметрическими методами (критерий Пирсона), так и непараметрическими (критерии Кенделла и Спирмена).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

Анализ результатов измерений эмиссионного дублета $MgII \lambda 2800\text{\AA}$ показал, что невозможно однозначно говорить о какой-либо корреляции блеска и эмиссионного спектра звезды. Наблюдается как быстрое, так и медленное изменение эмиссионного спектра. Более плотные ряды спектральных и фотометрических наблюдений показали, что при изменении блеска на $\Delta V=0.2^m$, т.е. при изменении потока в 1.2 раза, интенсивность линии меняется в несколько раз. В двух различных сериях наблюдений в одном случае эмиссионный спектр с блеском синхронно возрастает (JD 2445623-2445630), а в другом случае (JD 2447224-2447244), убывает. Третий ряд таких наблюдений определенной корреляции эмиссионного спектра с блеском не обнаруживает. Это свидетельствует о том, что изменение спектра и блеска происходит независимо. Возможно поэтому разные авторы получили противоречивые результаты: Холтсман и др. [36] получили уменьшение потока $H\alpha$ при ослаблении блеска, а Врба и др.[37] – увеличение потока в линии $H\alpha$ при ослаблении блеска звезды.

Поиск периода по массиву эмиссионного дублета $MgII \lambda 2800\text{\AA}$ показал, что одним из наиболее вероятных периодов может быть 23.26 дней. Также обнаружено увеличение интенсивностей группы эмиссионных линий $HeII \lambda 1640\text{\AA}$, $CIV \lambda 1756\text{\AA}$, $SII \lambda 1756\text{\AA}$ при фазах 0.4-0.5P с фазой найденного периода. Такой характер изменений обнаруживается далеко не у всех эмиссионных линий УФ спектра. Существует тенденция уменьшения интенсивностей в этой фазе для полузапрещенных линий $Si III] \lambda 1892 \text{\AA}$ и $C III] \lambda 1908\text{\AA}$. Это может указать на то, что области излучения, ответственные за периодическое изменение эмиссии, имеют ограниченные размеры и локальные физические условия.

Наблюдения, проведенные в 1975, 1984 и 1985гг., и анализ результатов спектральных наблюдений в оптическом диапазоне показали, что в то время как компоненты эмиссионной линии $H\alpha$ и линий H , $K CaII$ хорошо описываются периодом 23 дней, абсорбционные компоненты линий H_β и H_γ и H_δ не показали переменности с этим периодом. Обнаружено, что при фазе увеличения интенсивностей эмиссионных линий как в УФ, так и в оптической части спектра наблюдается смещение линий в коротковолновую часть спектра. Такой характер изменений часто наблюдается в двойных системах: при приближении компонента к наблюдателю увеличиваются интенсивности эмиссионных линий. Мы считаем, что возможно, этот факт указывает на орбитальное движение вокруг центральной звезды кометообразного тела. Отсутствие корреляции между изменением блеска и интенсивностью эмиссионных линий говорит о том, что, в целом, вклад излучения

в эмиссионных линиях у звезды RY Tau незначителен, поэтому изменение блеска не может быть чувствительным к изменению эмиссионных линий.

С помощью спектрального анализа среднегодовой кривой блеска были обнаружены наиболее вероятные периоды 22, 14 и 6 лет. Первый из этих периодов хорошо согласуется с данными Хербста [38], а последний - с данными [21, 23]. У звезд типа Т Тельца явления с периодами, превышающими период осевого вращения, можно объяснить наличием дополнительных компонентов в околозвездном пространстве [39,40]. Анализ среднегодовой кривой блеска показал, что кривую блеска звезды можно в первом приближении интерпретировать в трехкомпонентной модели с периодами 14 и 6 лет. Это является косвенным фактом в пользу гипотезы о многокомпонентной природе звезды. Наш анализ дает аргументы в пользу того, что существуют, по меньшей мере, несколько несформировавшихся тел около центральной звезды.

Согласно нашему анализу кривой РЭС, один из компонентов имеет температуру около 3000К, что соответствует спектральному классу М. По данным [22] период 2000 дней стабилен и наблюдается как по фотографическим, так и по фотоэлектрическим наблюдениям. Используя массу первичного компонента (для G-звезды) равной $1.6M_{\odot}$ (см например, [41]) и вторичного компонента с $0.5M_{\odot}$ (для М-звезды), можно оценить расстояние между компонентами при периоде около 6 лет в гипотетической двойной системе. При таких параметрах для большой полуоси орбиты получим $a=4.2a.e.$ Если учитывать массу и других околозвездных тел, то это расстояние изменится незначительно. Согласно данным [42], по полученным изображениям RY Tau в диапазоне 1.3мм и 2.8мм показано, что в околозвездном окружении, на расстоянии $10\div 50a.e.$ должны быть планеты типа более 5 масс Юпитера. Наши вычисления показали, что для подтверждения этих результатов в будущем нужно получить изображения околозвездного окружения с более высоким пространственным разрешением.

Интересно, что в момент вспышки в 1983г. фазы максимумов 14 и 6-летних Фурье кривых совпадают, т.е. в этот момент оба компонента выстраиваются по одну сторону от центральной звезды и гравитационные силы обоих компонентов могут создать значительное возмущение в околозвездном пространстве. В этом случае достаточно разумно предположить, что происходит отрыв некоторой массы вещества от верхних холодных слоев атмосферы звезды RY Tau. В результате центральная звезда частично раскрывается и светимость системы возрастает. В сгустке вещества, оторвавшегося от звезды, возникают благоприятные условия для процесса фрагментации и возникновения больших фрагментов прототел, которые время от времени беспорядочно затмевают звезду. Все вышеперечисленные явления не противоречат фотометрическим наблюдениям, а также современным теоретическим моделям образования планетных систем [43].

Таким образом можно сделать следующий вывод:

- Изменение V -значений блеска и эмиссионного дублета $MgII \lambda 2800\text{\AA}$ показало что, невозможно однозначно говорить о какой либо корреляции блеска и эмиссионного спектра звезды. Это свидетельствует о том, что переменность эмиссионного спектра и блеска имеют различную природу.
- Спектральные параметры группы линий эмиссионного спектра как в УФ ($MgII$, $HeII$, CIV и др.), так и в оптической части ($H+H$ и $K CaII$) меняются с периодом $P=23.26 \pm 0.06$ дней.
- В интервале времени 1983–2004гг. выявлено два наиболее вероятных периода изменения блеска звезды RY Tau: 14 и 6 лет. В комбинации 14 и 6 летних периодов нами построена синтетическая кривая блеска,

которая удовлетворительно описывает среднегодовую кривую блеска звезды.

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Фонда Развития Науки при Президенте Азербайджанской Республики (Грант № EIF-2011-1(3)-82/31/1).

1. A.H. Joy, *T Tauri variable stars*, *Astrophys. J.*, **102** (1945), 168-195.
2. G.H. Herbig, *Radial velocities and spectral types of T Tauri stars*, *Astrophys. J.*, **214** (1977) 747-758.
3. M.Cohen, L.V.Kuhi, *Observational studies of pre-main sequence evolution*, *Astrophys. J., Suppl. Ser.*, **41** (1979) 743-843.
4. S.Cabrit, S.Edwards, S.E.Strom, K.M.Strom, *Forbidden-line emission and infrared excesses in T Tauri stars*, *Astrophys. J.*, **354** (1990) 687-700.
5. P.P.Petrov, G.V.Zajtseva, Yu.S.Efimov, R.Duemmler, I.V.Ilyin, I.Tuominen, V.A.Scherbakov, *Brightening of the T Tauri star RY Tau in 1996*, *Astron.Astrophys.*, **341** (1999) 553-559.
6. P.Hartigan, S.Edwards, L.Ghandour, *Disk Accretion and Mass Loss from Young Stars*” *Astrophys. J.*, **452** (1995) 736-768.
7. J.A.Valenti, G.Basri, C.M. Johns, *T Tauri stars in blue*, *Astron. J.*, **106** (1993) 2024-2050.
8. З.А.Исмаилов, Б.Н.Рустамов, *Наблюдение линии Ha в период повышенного блеска звезды, Письма в АЖ.*, **13** (1987) 51-55.
9. Г.В.Зайцева, Е.А.Колотилов, П.П.Петров, А.Е.Тарасов, В.И. Шенаврин, А.Г.Щербаков, *Яркое состояние RY Tau - Спектроскопия и фотометрия, Письма в АЖ*, **11** (1985) 271-277.
10. C.M Johns, G.Basri, *Hamilton Echelle Spectra of Young Stars. II. Time Series Analysis of H (alpha) Variations*, *Astron. J.*, **109** (1995) 2800-2816.
11. G.H.Herbig, R.W.Goodrich, *Near-simultaneous Ultraviolet and Optical Spectrophotometers of T Tauri Stars*, *Astrophys. J.*, **309** (1986) 294-305.
12. N.L.Eaton, W.Herbst, L.A Hillenbrandt, *Rotation periods and Variability of Stars in the Trapezium Cluster*, *Astron. J.*, **110** (1995) 1435-1478.
13. С.А.Ламзин, *Анализ УФ спектров звезд типа T Тельца, полученных с космического телескопа: RY Tau и HD 115043, Письма в АЖ.*, **26** (2000) 683-694.
14. J.Bouvier, *Rotations in T Tauri stars II. Clues for magnetic activity*, *Astron. J.*, **99** (1990) 946-964.
15. C.Bertout, N.Robichon, F.Arenou, *Revisiting Hipparcos data for pre-main sequence stars*, *Astron. Astrophys.*, **352** (1999) 574-586.
16. T.L.Beck, M.Simon, *The Variability of T Tauri, RY Tauri, and RW Aurigae from 1899 to 1952*, *Astron. J.*, **122** (2001) 413-417.
17. W.Herbst, P.C.Stine, *Photometric variations of Orion population stars. III - RY Tau, T Ori, NV. Ori, and HH Aur*, *Astron. J.*, **89** (1984) 1716-1720.
18. W.Herbst, C.F.Booth, D.L.Koret et al, *Photometric variations of Orion population stars”. V - A search for periodicities*, *Astron.J.*, **94** (1987) 137-149.
19. W.Herbst, D.L.Koret, *Rotation periods of four T Tauri stars*, *Astron. J.*, **96** (1988) 1949-1955.
20. P.F.Chugainov, G.V.Zajtseva, M.N.Lovkaya, *Rotational light modulation and differential rotation of RY Tau epochs 1981-1986*, *Izvestia KrAO*, **83** (1991), 139-146.

21. G.V.Zajtseva, *Analysis of a 30-year series of photoelectric observations of RY Tauri. I. Search for possible periodicities*, *Astrophys. J.*, **53** (2010) 241-256.
22. G. V.Zajtseva, N. E.Kurochkin, *Long Period Variations of Ry-Tauri*, *Astronomicheskii tsirkulyar*, **3** (1980) NO.1126.
23. Н.З.Исмаилов, А.Н.Адыгезалзаде, *Анализ кривой блеска RY-Tau*, *Астрон. журн.*, **5** (2011) 5-15.
24. C.Bertout, G.Basri, J.Bouvier, *Accretion disks around T Tauri stars*, *Astrophys. J.*, **330** (1988) 350-373.
25. S.V.W.Beckwith, A.L.Sargent, R.S.Chini, R.Gusten, *A survey for circumstellar disks around young stellar objects*, *Astron. J.*, **99** (1990) 924-945.
26. N.Z.Ismailov, N.K.Quliyev, O.V.Khalilov, W.Herbst, *Periodic variability in the emission spectrum of T Tauri*, *Astron&Astrophys. J.*, **511** (2010) 131-138.
27. W.Herbst, V. S.Shevchenko, *A Photometric Catalog of Herbig AE/BE Stars and Discussion of the Nature and Cause of the Variations of UX Orionis Stars*, *Astron. J.*, **118** (1999) 1043-1060.
28. F.J.Vrba, A.E.Rydgren, P.F.Chugainov, N.I.Shakovskaya, D.S.Zak, *Further evidence for rotational modulation of the light from T Tauri Stars*, *Astrophys. J.*, **306** (1986) 199-214.
29. J.D.Scargle, *Studies in astronomical time series analysis. II. Statistical aspects of spectral analysis of unevenly spaced data*, *Astrophys. J.*, **263** (1982) 835-853.
30. A.I.Gomez de Castro Verdugo, *Evidence of stellar-driven outflows from the classical T Tauri star RY Tau*, *Astron. Astrophys.*, **654** (2007) 91-94.
31. K.N.Grankin, S.Yu.Melnikov, J.Bouvier et al., *The long-term photometric variability of classical T Tauri stars*, *Astron. Astrophys.*, **461** (2007) 183-195.
32. J.W.Cooley, J.W.Tukey, *An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series*, *Math.Comp.*, **19** (1965) 297-301.
33. D.M.Monro, B.L.Branch, *The chirp discrete Fourier transform of general length*, *Appl. Stat.*, **26** (1976) 351-361.
34. R.H.Shumway, *Applied statistical time series analysis* (Englewood Cliffs, NJ: Prentice Hall, (1988).
35. Н.З.Исмаилов, П.Н.Шустарев, Ф.Н.Алимарданова, А.А.Алиева, *Поиск долгопериодических изменений блеска и спектра молодых звезд*, *Астрономический журнал*, **86** (2009) 694-701.
36. J.A.Holtzmann, W.Herbst, J.Booth, *Photometric variations of Orion population stars. IV. Coordinated spectroscopy in 1984/85 with some success for RY Tau*, *Astron. J.*, **92** (1986), 1387-1395.
37. F.J.Vrba, P.F.Chugainov, W.B.Weaver, J.S.Stauffer, *Photometric and spectroscopic monitoring of AA Tau, DN Tau, UX Tau A, T Tau, RY Tau, LK CA 4, and LK CA 7*, *Astron. J.*, **106** (1993) 1608-1626.

38. W.Herbst, *T Tauri variables*, *Publ. Astron. Soc. Pacif.*, **98** (1986) 1088-1094.
39. С.А.Артеменко, К.Н.Гранкин, П.П.Петров, *Поиск кеплеровских периодов в изменениях блеска звезд типа Т Тельца и Ae Хербига*, *Астрон. журн.*, **87** (2010) 1-11.
40. N.Z.Ismailov, K.N.Grankin, *Synchronous UBV photometry and spectroscopy of DI Cephei*, *Astron. Lett.*, **134** (2007) 33-52.
41. D.R.Ardila, G.Bari, F.M.Walter, J.A.Valenti, C.M.Johns-Krull, *Observations of T Tauri stars using the Hubble space telescope GHRS. I.Far -ultraviolet emission lines*, *Astrophys. J.*, **566** (2002) 1000-1023.
42. A.Isella, J.M.Carpenter, A.I.Sargent, *Investigating planet formation in circumstellar disks: CARMA observations of RY Tau and DG Tau*, *Asrophys. J.*, **714** (2010) 1746-1771.
43. A.I.Gomez de Castro, A.Lecavelier, M.D.Aviliez, J.L.Linsky, J.Cernicharo, *UV capabilities to probe the formation of planetary systems: from the ISM to planets*, *Astron.Space Sci.*, **303** (2006) 33-52.

RY-TAU ULDUZUNUN SPEKTR VƏ PARLAQLIĞININ TƏDQIQI

N.Z.ISMAYILOV, P.N.SHUSTAREV, B.N.RÜSTƏMOV, H.N.ADİGÖZƏLZADƏ

RY Tau ulduzunun İUE tərəfindən aparılmış 10 illik UB spektral müşahidələri əsasında alınan *MgII* $\lambda 2800\text{\AA}$ şüalanma xəttinin nəticələri verilir. 1983÷1984-cü illərdə parlaqlığın kəskin dəyişməsinə baxmayaraq *MgII* $\lambda 2800\text{\AA}$ şüalanma xətti UBV fotometrik nəticələrlə sinxron dəyişmə göstərməmişdir. İki ayrıca aparılmış kvazisinxron UB spektral müşahidə əsasında göstərilmişdir ki, parlaqlığın monoton artdığı və ya azaldığı hallarda şüalanmanın intensivliyi eyni qaydada dəyişmir. İlk dəfə şüalanmanın intensivliyinin 23 günlük periodla dəyişməsi aşkar olunmuşdur. Periodiklik həmçinin *CIV* $\lambda 1450\text{\AA}$, *HeII* $\lambda 1640\text{\AA}$, *SII* $\lambda 1756\text{\AA}$ xətləri üçün də müşahidə olunur. Alınmış period optik diapazonda aparılan müşahidələrdə də özünü göstərmişdir. Qurulmuş spektral enerji paylanması əyrisini temperaturları 6000, 3000 və 90 K olan cisimlərin istilik şüalanması kimi təsvir etmək mümkündür. Parlaqlığın aparılmış Furiye analizi 14 və 6 illik periodların mövcud olmasını ehtimal etməyə imkan vermişdir. Qurulmuş sintetik işıq əyrisi illik orta işıq əyrisi ilə qənaətedici uyğunluq təşkil edir.

INVESTIGATION OF SPECTRUM AND BRIGHTNESS RY TAU

N.Z.ISMAILOV, P.N.SHUSTAREV, B.N.RUSTAMOV, H.N.ADİGOZALZADE

UV spectral observations of the IUE data results of *MgII* $\lambda 2800\text{\AA}$ emission doublet of the star RY Tau On the 10 year have been presented. The emission doublet *MgII* $\lambda 2800\text{\AA}$ showed no change with simultaneous UB-photometric data despite the considerable variability of brightness in 1983÷1984. The monotonically increasing and fading observed an ambiguous variation in emission intensity has been shown on two series of quasi-photometric and UV spectroscopic observations. Firstly has been detected a periodic variability of emission intensities with a period of 23 days. The periodicity has been also observed for a group of such lines as *CIV* $\lambda 1450\text{\AA}$, *HeII* $\lambda 1640\text{\AA}$, *SII* $\lambda 1756\text{\AA}$. The observed period also has revealed the results of observations in the optical spectrum. Constructed SED curve has shown the radiation of the star has been a composite, and this radiation could be represented by thermal radiation of bodies with temperatures of 6000, 3000, and 90K. Carried out spectral Fourier analysis of light has revealed the probable periods of 14 years and 6 years. Obtained synthetic light curve has been in satisfactory agreement with the average light curve of the star.

Редактор: И.Юсифов

UOT-524.4

HD223385 (6 CAS A3Ia) ULDUZU ATMOSFERİNDƏ DƏYİŞKƏNLİKLƏRİN SPEKTROSKOPİK TƏDQIQI

Y.M.MƏHƏRRƏMOV, İ.M.MƏMMƏDOVA, Ə.Ş.BALOĞLANOV

N. Tusi adına Şamaxı Astrofizika Rəsədxanası

AZ 372 243, Şamaxı şəh.

y_meherremov@rambler.ru

Daxil olub: 16.05.2011
Çapa verilib: 12.09.2011

Açar sözlər: Əfratnəhəng, absorbsiya, diskret komponent.

REFERAT

Bu məqalədə 6 Cas ulduzu spektrlərində H_α və H_β xətləri profillərinin struktur dəyişkənliyi, $\dot{M}$ sürəti və digər spektral parametrlərin dəyişmələri tədqiq olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, H_α xətti profilinin absorbsiyasında diskret komponentlər yaranır, yerini dəyişir və yox olur. Fərqi analizin köməyi ilə bu diskret komponentlərdə $\dot{M}$ sürəti dəyişiklikləri üçün 24.1^d və 285.7^d günlük periodlar tapılmışdır.

GİRİŞ

Əfratnəhənglər böyük kütləyə, geniş örtüyə və yüksək işıqlığa malik olan ulduzlardır. Bunlara ən çox ulduz assosiasiyalarında və cavan seyrək ulduz topalarında rast gəlmək olur. Əfratnəhənglərin əksəriyyətində maddə axını baş verir ki, bunun da əsas səbəbi ulduz örtüyündə baş verən genişlənmə və digər mexanizmlərdir. Bu baxımdan 6 Cas işıqlıq və kütlə itgisi tempinə görə ağ ifratnəhənglərlə LBV-s (Luminous Blue Variable Stars) arasında ən çox diqqəti cəlb edən ulduzdur. Belə ki, bu ulduz yeganə obyektədir ki, A2 və F0 spektral sinifləri arasında yerləşir və adi ağ ifratnəhəng ulduz olmaqla ağırlıq qüvvəsi təcilinin kiçik anomal dəyişmələri ilə digərlərindən fərqlənir. 6 Cas ulduzu P Cyg tipli ulduzlar qrupuna aiddir və başqalarından fərqli olaraq onun optik və ultrabənövşəyi spektrlərində bənövşəyi və qırmızı tərəfə sürüşmüş komponentlər müşahidə olunur. Digər P Cyg tip ulduzlardan fərqli olaraq 6 Cas ulduzu spektrlərində H_α –da udulma (absorbsiya) və şüalanma (emissiya) komponentlərində tez-tez dəyişmə müşahidə olunur [1,12]. Hesab edilir ki, B, A, F siniflərinə daxil olan parlaq ifratnəhənglərdə $\dot{M}$ sürətləri və H_α xəttinin profili dəyişəndir [2,3,15].

Əfratnəhəng ulduzların spektroskopiyasında xəttin əsas parametrlərinin (ekvivalent en, yarım en, tam en, qalıq intensivliyi, $\dot{M}$ və turbulent sürətlər və.s) tədqiqi əsasında həmin ulduzların atmosferlərinin fundamental öyrənilməsi kifayət etmir. Bu baxımdan H_α xəttinin profillərində müşahidə olunan detalların tədqiqi xüsusi əhəmiyyət kəsb edir. Bu xətt örtük boyunca və atmosferin ulduz küləyinin yarandığı üst qatlarında əmələ gəlir ki, nəticədə H_α xətti profilinin absorbsiya hissəsində çox komponentli struktur müşahidə olunur. Beləliklə müşahidə olunan Diskret Absorbsiya Komponentləri (DAK-lar) yaranır, kontur boyunca sürüşür və müəyyən müddətdən sonra itir. Çünki 6 Cas ulduzunun H_α xəttinin profilində heç bir periodik dəyişməlik müəyyən edilməmişdir. H_α xətti profilinin şüalanma komponentində isə heç bir detal müşahidə olunmur, lakin zamana görə bəzi spektral (W_λ –ekvivalent en, r_v -qalıq intensivliyi, $\Delta\lambda_{1/2}$ -yarım eni, $\Delta\lambda$ -tam eni) parametrləri dəyişir.

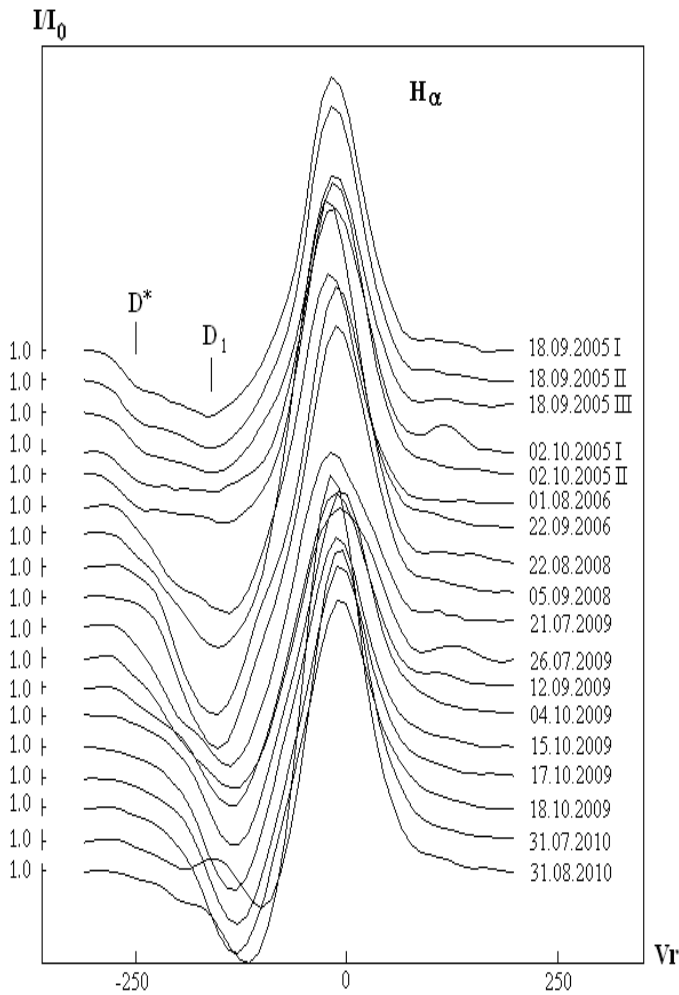
6 Cas ulduzu atmosferində müşahidə olunan qeyri stasionarlığın tədqiqi üçün hələ çox analiz və interpersiyaların verilməsinə ehtiyac var. Hazırkı məqalədə əsas məqsəd H_α və H_β xətlərində $\dot{M}$ sürətlərinin və digər bütün spektral parametrlərin dəyişməsinin monitorinqini aparmaqdan ibarətdir.

1998-2010-cu illərdə AMEA N.Tusi adına 2m-lik teleskopunun Kude və Kasseqren fokuslarında quraşdırılmış müasir CCD spektrometri vasitəsilə 6 Cas ulduzunun spektrləri alınmışdır [13]. Yeni spektrlərin az olması səbəbindən H_{α} –da DAK-ların 9üasürətlərinin monitoringini aparmaq üçün əvvəllər alınmışspektrlərdən də istifadə olunmuşdur[10,11]. Alınan spektrlər DECH-20 və DECH-20T paket proqramları vasitəsilə i9ünmüşdür [14]. 9üa sürətləri üçün ölçmə xətası $\pm 2\text{km/s}$, ekvivalent en üçün xəta $5\div 7\%$ -dir.

Alınmışspektral materiallar sistematiklik tə9ki etmir və yalnız ilkin monitoring aparmaq üçün yetərlidir.

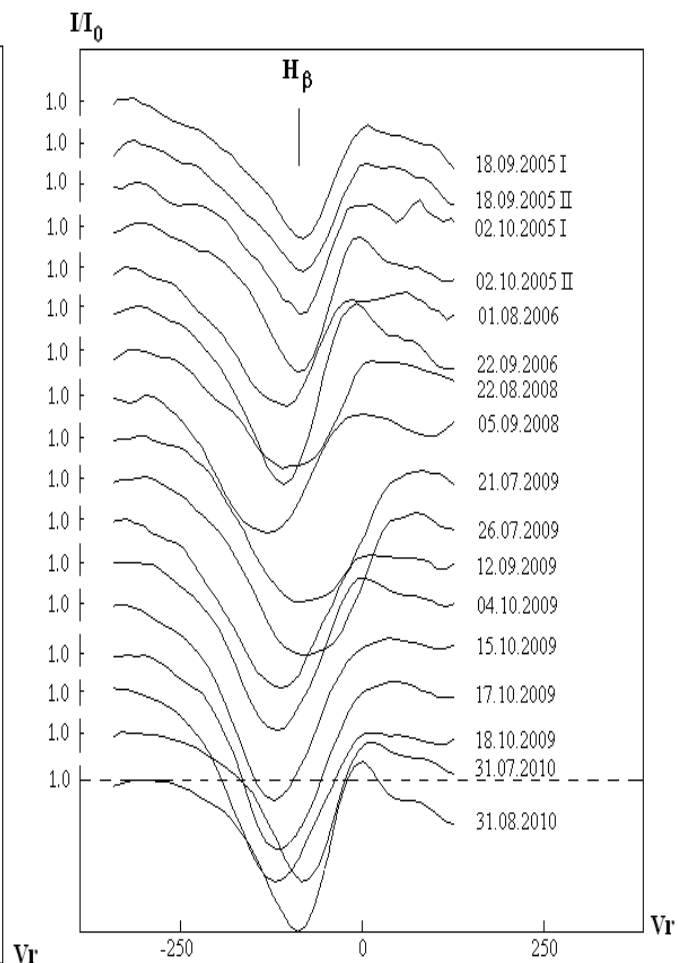
H_{α} VƏ H_{β} XƏTTİ9PROFİLLƏRİNİN MONİTORİNGİ

6 Cas ulduzunun çoxillik mü9hidələri göstərir ki, bu ulduzun H_{α} xətti profilində emissiya, enli və dərin olmayan absorbsiya xəttindən başqa absorbsiya daxilində yax9 ayırd oluna bilən diskret udulma komponentləri də mü9hidə olunur. Amma bu DAK-lar müəyyən müddətdən sonra yox olur, ümumi absorbsiya isə həmişə enli və dərin olmayan 9kildə görünür. Qeyd edək ki, 6 Cas üçün H_{α} xətti profilinin yalnız udulma komponentindən ibarət olması 1976-1977-ci illərdə mü9hidə olunub. 1993-cü il tarixində isə absorbsiyada iki udulma komponenti mü9hidə olunub [10]. Bu xətlər və onların komponentləri ulduz küləyi ilə əlaqədardır.



Şəkil.1.

H_{α} xəttinin 9üa sürəti və intensivlikdən asılı profili.



Şəkil.2.

H_{β} xəttinin 9üa sürəti və intensivlikdən asılı profili.

Cədvəl.1

Spektrlərin alınma tarixi	$V_{r1/2}$ (D*) km/s	V_r (D ₁) km/s	r_v (abs)	r_v (em)	$\Delta\lambda_{1/2}$ (abs) Å	$\Delta\lambda_{1/2}$ (em) Å	$\Delta\lambda$ (abs) Å	$\Delta\lambda$ (em) Å	$\Delta\lambda$ cəm Å	W (abs) Å	W (em) Å
	H _α	H _α	H _α	H _α	H _α	H _α	H _α	H _α	H _α	H _α	H _α
18.09.1998	-247	-129	0.52	1.61	2.1	1.0	4.3	3.4	7.7	1.00	1.83
18.09.1998	-246	-127	0.51	1.72	2.2	1.2	4.1	3.4	7.5	1.05	1.82
18.09.1998	-247	-131	0.50	1.70	2.1	1.6	4.2	3.2	7.4	1.08	1.71
18.09.1998	-247	-128	0.51	1.62	2.2	1.6	4.2	3.2	7.4	1.03	1.79
18.09.2005	-246	-164	0.78	1.85	3.2	1.6	4.8	5.7	10.5	0.60	1.71
18.09.2005	-245	-161	0.77	2.02	3.2	1.6	4.8	5.6	10.4	0.62	1.64
18.09.2005	-236	-158	0.79	2.03	3.9	1.6	4.8	5.1	9.9	0.57	1.55
02.10.2005	-246	-153	0.83	1.80	3.5	1.8	5.1	5.5	10.6	0.50	1.54
02.10.2005	-240	-145	0.82	2.20	3.4	1.7	5.2	5.4	10.6	0.54	1.66
01.08.2006	-200	-141	0.62	1.78	2.6	1.5	4.3	3.6	7.9	0.95	1.25
22.09.2006	-	-153	0.62	2.12	2.5	1.6	4.2	6.2	10.4	0.90	2.10
22.08.2008	-	-155	0.50	1.94	2.0	1.6	4.3	6.1	10.4	1.05	1.63
05.09.2008	-	-152	0.48	1.92	2.0	1.7	4.7	5.4	10.1	1.05	1.65
21.07.2009	-186	-139	0.52	1.58	2.7	1.9	4.6	6.7	11.3	1.15	1.14
26.07.2009	-239	-132	0.54	1.48	2.8	2.0	4.8	4.8	9.6	1.16	0.91
12.09.2009	-243	-136	0.59	1.64	2.3	1.6	4.6	5.3	9.9	0.87	1.22
04.10.2009	-	-133	0.57	1.76	2.0	1.8	4.6	6.1	10.7	0.84	1.40
15.10.2009	-245	-134	0.52	1.71	1.8	1.5	5.0	5.1	10.1	0.94	1.25
17.10.2009	-	-131	0.50	1.71	1.7	1.6	4.9	5.6	10.5	0.96	1.27
18.10.2009	-246	-132	0.52	1.70	1.8	1.6	4.3	5.0	9.3	0.93	1.29
31.07.2010	-194	-102	0.76	1.97	2.8	1.7	4.7	5.5	10.2	0.45	1.68
31.08.2010	-188	-119	0.68	2.35	2.1	1.5	4.7	4.7	9.4	0.59	2.26

Əvvəlcədən məlum olan H_α xətti profilinin və Ȧ sürətlərinə bizim aldığımız yeni qiymətlər əlavə olunduqdan sonra onun detallarının zamandan asılı olaraq variyasiyası haqqında məlumat genişləndi və həmçinin periodikliyin tapılması ehtimalı artdı [11].

gəkil 1-də 2005-2010-cu illərdə alınmış spektrlər əsasında H_α xəttində Ȧ sürətinin qalıq intensivliyinə görə profilləri verilib. gəkil 1 və Cədvəl 1-dən görünür ki, H_α xətti profillərində həm komponentlərin, həm də profilin struktur dəyişməsi əsasən mərkəzi hissədə baş verir. 18.09.2005-ci ildə alınmış müqayisə materialından görünür ki, H_α xəttinin profili iki udulma və bir qırmızı tərəfə sürüşmüş emissiya komponentindən ibarətdir. H_α profilindəki DAK-ların profil üzərində hərəkətinin dinamikası və dəyişənliyi 02.10.2005-ci illərdə alınmış spektrlərdən də aşkar görünür. gəkil.1-dən aydın olur ki, 01.08.2006-cı il tarixinə uyğun profildə D₁ komponenti aydın müşahidə olunsada D* diskret komponenti zəifləmişdir. 22.09.2006-cı il tarixində isə D* komponenti tamamilə itmişdir. 22.08.2008 və 05.09.2008 –ci il tarixlərində alınmış spektrlərdə H_α profilində yalnız ümumi absorbsiya komponenti (yəni D₁) müşahidə olunur, 2-ci D* komponenti isə yox olmuşdur

2009-cu ildə daha intensiv müşahidələr aparıldığından qeyd olunan faktlara daha tez-tez rast gəlinmişdir. Cədvəl 1 və şəkil 1-dən göründüyü kimi 21.07.2009, 26.07.2009, 12.09.2009, 15.10.2009 və 18.10.2009-cu il tarixli müşahidə materiallarında 2-ci D^* komponenti zəif olsa da müşahidə edilmişdir. Lakin 04.10.2009 və 17.10.2009-cu il tarixlərində isə həmin 2-ci diskret komponent müşahidə olunmur.

6 Cas ulduzu üçün 2010-cu ildə aparılmış 31.07.2010 və 31.08.2010-cu il tarixli müşahidə materialları bu baxımdan daha çox uğurlu olmuşdur Doğrudan da şəkil 1-dən görünür ki, 31.07.2010-cu il tarixində alınmış spektrdə 2-ci D^* komponenti maksimum dərinlik səviyyəsində müşahidə olunur. Lakin 31.08.2010-cu il tarixinə uyğun profildən görünür ki, absorbsiyada yaranıb yoxa çıxan ikinci diskret D^* komponenti nisbətən zəifləmiş olsa da yenə də müşahidə olunur.

Müşahidə materiallarında H_α xətti profilinin ümumi absorbsiya komponentində 3 və daha çox diskret udulma komponentlərinin də yarandığı müşahidə olunmuşdur Lakin bu işə əsasən qırmızı tərəfdə olan 1-ci (D_1) və ən çox bənövşəyi tərəfə sürüşmüş sonuncu (D^*) komponentlərindəki şüasürətlərinin dəyişməliklərinə baxılmışdır.

Bu diskret detallar əvvəlcə qırmızı tərəfdə əmələ gəlir və sonra bənövşəyi tərəfə sürüşür. Göründüyü kimi 6 Cas ulduzunda H_α xətti profilinin struktur dəyişməliyi əsasən absorbsiya komponentində baş verir. Bu zaman emissiya komponenti öz yerini dəyişməklə də onda heç bir diskret komponent müşahidə olunmur.

Qeyd edək ki, H_α xətti profilinin ümumi absorbsiya hissəsində yaranan diskret udulma komponentləri ulduz atmosferinin yuxarı qatlarında – ulduz küləyi yaranan qatlarda yaranır ki, bunlara bəzən külək komponentləri də deyilir. Onu da əlavə etməliyik ki, profilin absorbsiya hissəsində meydana çıxan bu külək komponentləri – onların yaranması və inkişafı fotosfer xətləri ilə də sıx bağlıdır. Hələ indiyə qədər 6 Cas-ın H_α xətti profilində belə külək komponentlərinin yaranması, inkişafı və onların yox olması hadisələrinin dəqiq periodikliyi müəyyən edilməmişdir.

6 Cas ulduzu atmosferinin tədqiqi üçün alınmış müşahidə materiallarında H_β xətti profilinin öyrənilməsi də əsas yer tutur. Ona görə də bu işə H_β profilinin struktur dəyişməliyinə baxılmış, şüa sürəti və həm də spektral parametrlərin qiymətləri ölçülmüşdür 6 Cas ulduzunda H_β xətti profili bir qayda olaraq həmişə udulma komponenti kimi müşahidə olunur.

şəkil 2-dən görünür ki, 6 Cas-ın H_β xətti profilində də ciddi struktur dəyişməliyi müşahidə olunur. Belə ki, profilin həm bənövşəyi, həm də qırmızı tərəfə kəskin sürüşmələri və beləliklə ümumi udulma komponentinin mərkəzi hissəsinin müxtəlif istiqamətlərdə kəskin yerdəyişmələri diqqəti cəlb edən haldır. Bundan əlavə H_β xətti profilinin dərinliyinin artıb azalması, xəttin yarım eninin böyük dəyişmələri vizual olaraq aşkar görünür.

Nəhayət daha maraqlı müşahidə faktı kimi 31.08.2010-cu il tarixində alınmış spektrdə H_β xətti profilinin qırmızı qanadında zəif emissiya komponentinin yaranması müşahidə olunmuşdur Həmin emissiya komponentinin qalıq intensivliyi ölçülərək $r_v=1.03$ olduğu müəyyən edilmişdir.

Məlumdur ki, ulduz atmosferində H_β xətti H_α -ya nəzərən daha dərin qatlarda yaranır. Göründüyü kimi H_β xətti profilində də yuxarıda qeyd olunan dəyişməliklər onu deməyə əsas verir ki, ifratnəhənglərə xas olan ulduz küləyi və pulsasiya prosesi təkcə atmosferin örtüyə yaxın üst qatlarında deyil, atmosferin daha dərin qatlarında da güclü dəyişməliklər yaradır ki, bu da xəttin profilində özünü göstərir.

Bu məqalədə 6 Cas ulduzu spektrlərində H_{α} xətti profillərinin diskret komponentlərində Güasürətləri, o cümlədən H_{α} və H_{β} xətlərində Güa sürəti, ekvivalent en, xətlərin yarım eni, tam eni və qalıq intensivliklərinin qiymətləri analiz olunmuşdur. Cədvəl 1-dən görünür ki, H_{α} -da xəttin r_v qalıq intensivliyi, $\Delta\lambda_{1/2}$ yarım eni, $\Delta\lambda$ tam eni və W_{λ} ekvivalent eni uyğun olaraq absorbsiyada $0.50 \div 0.83$, $1.7 \div 3.9 \text{ \AA}$, $4.1 \div 5.2 \text{ \AA}$ və $0.45 \div 1.16 \text{ \AA}$, emissiyada isə $1.48 \div 2.35$, $1.0 \div 2.0 \text{ \AA}$, $3.2 \div 6.7 \text{ \AA}$ və $0.91 \div 2.26 \text{ \AA}$ intervalında dəyişir. Xəttin hər bir spektral parametrlərinin aldığı maksimum qiymətin onun minimum qiymətinə nisbətində dəyişiklik nisbəti desək, bu yeni meyar əsasında dəyişikliklərin analizindən görünür ki, H_{α} xətti profilinin absorbsiyasında xəttin tam eni və qalıq intensivliyində uyğun dəyişikliklər nisbəti ~ 1.3 və ~ 1.7 dəfə olmaqla zəifdir, lakin xəttin yarım eni və ekvivalent enlərinin qiymətlərindəki nisbətlər isə ~ 2.3 və ~ 2.5 dəfə olmaqla güclü dəyişikliklərə bağıverir. Absorbsiyadan fərqli olaraq emissiyada yalnız xəttin r_v qalıq intensivliyi güclü dəyişikliyə məruz qalmır, digər bütün spektral parametrlərinin qiymətlərindəki nisbətlər ($\max/\min$) $\sim 2.0 \div \sim 2.5$ dəfə olmaqla güclü dəyişikliklərə bağıverir.

Cədvəl 2-dən görünür ki, H_{β} -da xəttin r_v qalıq intensivliyi, $\Delta\lambda_{1/2}$ yarım eni, $\Delta\lambda$ tam eni və W_{λ} ekvivalent eni uyğun olaraq $0.50 \div 0.75$, $1.4 \div 3.2 \text{ \AA}$, $4.2 \div 6.1 \text{ \AA}$ və $0.64 \div 1.32 \text{ \AA}$ intervalında dəyişir. Bu dəyişikliklərin analizindən məlum olur ki, yalnız absorbsiya komponentindən ibarət olan H_{β} xətti profilində xəttin tam eni və qalıq intensivliyində uyğun dəyişikliklər nisbəti ~ 1.5 dəfə olmaqla zəifdir, lakin xəttin ekvivalent en və yarım enlərinin qiymətlərindəki nisbətlər isə ~ 2.1 və ~ 2.3 dəfə olmaqla daha güclü dəyişikliklərə bağıverir.

Beləliklə H_{α} və H_{β} xətti profillərində absorbsiya komponentləri üçün uyğun spektral parametrlərin (r_v , $\Delta\lambda_{1/2}$, $\Delta\lambda$ və W_{λ}) yuxarıda qeyd olunan dəyişikliklərinin nisbətlərini müqayisə etsək aşkar olur ki, hər iki xəttin tam eni və qalıq intensivliyində nisbətən zəif, yarım en və ekvivalent enlərində isə daha güclü dəyişikliklərə bağıverir. Bununla da hər iki xəttin absorbsiyasında eyni spektral parametrlərdə bağı verən dəyişikliklər arasında nəticə etibarlı ilə maraqlı uyğunluq aşkar edilmişdir.

Digər tərəfdən cədvəl 1 və cədvəl 2-də verilmiş H_{α} və H_{β} üçün spektral parametrlərin qiymətlərini analiz etsək aşkar olunur ki, hər iki xəttin absorbsiyalarında uyğun spektral parametrlərin minimum və maksimum qiymətləri əksər hallarda eyni tarixlərə uyğundur. Nümunə üçün W_{λ} -nın qiymətlərini qeyd etmək olar. Belə ki, H_{α} -da $\min(W_{\lambda}) = 0.45 \text{ \AA} \rightarrow 31.07.2010$ və $\max(W_{\lambda}) = 1.16 \text{ \AA} \rightarrow 26.07.2009$ -cu il tarixlərinə uyğun gəlir. Eyni ilə H_{β} -da da $\min(W_{\lambda}) = 0.64 \text{ \AA} \rightarrow 31.07.2010$ və $\max(W_{\lambda}) = 1.32 \text{ \AA} \rightarrow 26.07.2009$ –cu il tarixlərinə uyğun gəlir.

Şəkil 1-dən göründüyü kimi H_{α} xəttinin profillərində emissiya və bənövşəyi tərəfə ən çox sürüşmüş DAK-lar (D^*) müşahidə olunur. Həmin müşahidə olunan DAK-lar kontur boyunca yerlərini dəyişir. Cədvəl 1 və 3-də H_{α} xətti profilində DAK-ların heliosentrik Güasürətlərinin qiymətləri verilmişdir. Müqayisə üçün digər [10-12]-dən götürülmüş qiymətlərdən də istifadə olunmuşdur [10]-da qeyd olunmuşdur ki, Güa sürətlərinin zamana görə dəyişməsi həm ulduz fotosferinin dərinliyi və həm də ulduz küleyi ilə əlaqədardır. Cədvəl 1, 2 və 3-dən və Şəkil 1-dən görünür ki, DAK-lar (D_1 və D^*) üçün Güa sürətlərinin qiyməti uyğun olaraq $-164 \text{ km/s} \div -102 \text{ km/s}$ və $-247 \text{ km/s} \div -135 \text{ km/s}$, H_{β} xəttində isə $-136 \text{ km/s} \div -84 \text{ km/s}$ intervalında dəyişir. Ölçmələrin nəticələrindən müəyyən edilir ki, H_{α} –da D^* üçün $\varphi = 0.95 \div 1.0$ (həm də $\varphi = 0 \div 0.1$) fazaları ətrafında Güa sürətinin qiyməti modulca maksimum, $\varphi = 0.2 \div 0.3$ intervalında isə minimumdur. H_{β} -da isə $\varphi = 0.9$ və $\varphi = 0 \div 0.1$ intervalında Güasürətinin qiyməti modulca minimum, $\varphi = 0.6 \div 0.7$ intervalında isə modulca maksimumdur.

Cədvəl.2.

Spektlərin alınma tarixi	$V_{r1/2}$; (km/s) H_{β}	r_v H_{β}	$\Delta\lambda_{1/2}$; (Å) H_{β}	$\Delta\lambda$; (Å) H_{β}	W ; (Å) H_{β}
18.09.1998	-105	0.50	1.8	5.9	1.03
18.09.1998	-106	0.56	1.7	4.8	0.84
18.09.1998	-104	0.52	1.8	4.5	0.93
18.09.1998	-105	0.54	1.6	4.4	0.89
18.09.2005	-102	0.68	2.1	5.3	0.71
18.09.2005	-103	0.70	2.0	5.5	0.67
18.09.2005	-104	0.72	2.0	5.4	0.68
02.10.2005	-88	0.69	1.8	5.0	0.65
02.10.2005	-87	0.75	1.5	5.0	0.66
01.08.2006	-121	0.58	2.3	5.1	0.94
22.09.2006	-117	0.66	1.9	4.8	0.86
22.08.2008	-135	0.71	2.5	5.1	0.75
05.09.2008	-136	0.66	2.4	4.5	0.87
21.07.2009	-84	0.59	3.2	6.1	1.27
26.07.2009	-85	0.57	3.1	5.6	1.32
12.09.2009	-120	0.59	2.7	5.0	1.08
04.10.2009	-117	0.59	2.3	5.1	0.95
15.10.2009	-118	0.53	2.2	5.7	1.20
17.10.2009	-111	0.51	2.1	6.0	1.28
18.10.2009	-115	0.53	1.4	5.9	1.20
31.07.2010	-85	0.64	1.7	5.3	0.64
31.08.2010	-95	0.61	1.7	4.2	0.71

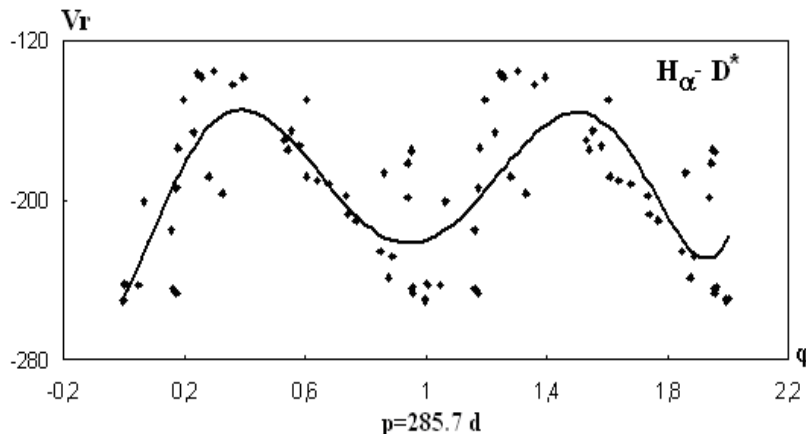
Cədvəl.3.

Φ	V_r (km/s)		
	H_{α} ; D^*	H_{α} ; D_1	H_{β}
0.943	-181	-	-
0.951	-175	-	-
0.954	-176	-	-
0.195	-145	-	-
0.245	-136	-	-
0.258	-138	-	-
0.301	-135	-	-
0.360	-142	-	-
0.179	-174	-	-
0.397	-138	-	-
0.604	-150	-	-
0.232	-166	-104	-
0.532	-170	-125	-
0.542	-175	-132	-
0.608	-188	-130	-130
0.637	-190	-140	-
0.735	-198	-138	-
0.941	-199	-154	-
0.159	-215	-179	-
0.330	-197	-145	-
0.554	-165	-90	-102
0.582	-173	-115	-105
0.680	-192	-112	-106
0.743	-207	-138	-
0.768	-210	-142	-135
0.851	-225	-158	-
0.887	-228	-162	-
0	-247	-129	-105
0.999	-246	-127	-106
0.998	-247	-131	-104
0.997	-247	-128	-105
0.954	-246	-164	-102
0.957	-245	-161	-103
0.960	-236	-158	-104
0.004	-246	-153	-88
0.007	-240	-145	-87
0.064	-200	-141	-121
0.246	-	-153	-117
0.696	-	-155	-135
0.745	-	-152	-136
0.861	-186	-139	-84
0.879	-239	-132	-85
0.047	-243	-136	-120
0.124	-	-133	-117
0.162	-245	-134	-118
0.169	-	-131	-111
0.173	-246	-132	-115
0.174	-194	-102	-85
0.282	-188	-119	-95

H_{α} xətti profillərinin diskret komponentlərdə ölçülən G_{α} sürətlərinin müqayisəsindən aydın olur ki, bunlar hər hansı qanunauyğunluq təşkil etmir. Beləliklə H_{α} xətti profilinin həm struktur və həm də G_{α} sürətlərinin dəyişmə monitorinqi göstərdi ki, ən çox dəyişənliklər udulma komponentində baş verir.

6 Cas ulduzu spektrlərində H_α xətti profilinin absorbsiya hissəsində diskret komponentlərin yaranıb-yox olmasının təkrarlanması həmin hadisənin periodik ola bilməsi təsəvvürlərini yaratdı. Ona görə də ilk növbədə H_α xəttində $\dot{G}$ sürətlərinin dəyişməsinin hansısa periodikliyə malik olması ehtimalı nəzərdən keçirilmişdir. Bununla belə qeyd edək ki, P Cyg tip ifratnəhəng ulduzlarda atmosfer parametrlərinin dəyişməsində dəqiq periodiklik müşahidə olunmur, amma bir sıra hallarda həmin atmosfer parametrləri xarakterik vaxtla dəyişir ki, bu da kvaziperiodiklik adlanır.

Kvaziperiodiklik atmosfer qatlarının ulduzun kütlə mərkəzinə nəzərən kvaziperiodik hərəkəti ilə bağlıdır. Məlumdur ki, müşahidə olunan kvaziperiodiklik



ifratnəhənglərin iqlığı ilə müəyyən əlaqəsi var [15]. Bu münasibətlərdən istifadə edərək 6 Cas-da kvaziperiod üçün $P_s=24.1^d$ gün, fundamental period üçün isə $P_0=1286^d$ günlük period tapılmışdır.

Şəkil.3.

H_α -nın D^* diskret udulma komponentində $\dot{G}$ sürətlərinin fazadan asılılıq əyrisi.

Furye analiz tətbiq olunmaqla cədvəl 3-dəki qiymətlər əsasında H_α -nın ən çox bənövşəyi tərəfə sürülmüş D^* komponentində $\dot{G}$ sürəti dəyişməliklərinin periodunun təyini üçün güc spektri qurularaq 285.7^d günlük dayanıqlı period tapılmışdır. Bu perioda uyğun əyri ($\dot{G}$ sürətlərinin fazadan asılılıq əyrisi) Şəkil 3-də göstərilmişdir. Əyridən görüldüyü kimi periodun tapılması 285.7^d qiymətini qənaətbəxş hesab etmək olar. Həmçinin 98.5^d , 103.1^d , 135.1^d günlük periodlar da tapıldı, lakin onlardan ən ehtimalı olanı $P=285.7^d$ gündür.

H_β -da $\dot{G}$ sürətlərinin periodikliyinə müəyyən edilməsi ilə bağlı H_α -nın diskret komponenti üçün periodun tapılması $P=285.7^d$ gün qiyməti uyğun gəlmədi. Digər tərəfdən güc spektri qurulmaqla Furye analiz vasitəsilə ayrıca olaraq H_β -da $\dot{G}$ sürətlərinin dəyişməliyində hansısa periodiklik aşkar olunmadı.

NƏTİCƏLƏR

6 Cas ulduzu örtüyünün faza aktivliyindən asılı olaraq H_α xətti profilinin absorbsiya komponentində diskret udulma detalları müşahidə olunur. Lakin emissiya komponentində belə detallar müşahidə olunmur.

H_α -nın absorbsiya komponentində yaranan ən çox bənövşəyi tərəfə sürülmüş D^* diskret komponentinin $\dot{G}$ sürətləri $-247\text{km/s} \div -135\text{km/s}$ intervalında, D_1 komponentində $\dot{G}$ sürətləri isə $-164\text{km/s} \div -102\text{km/s}$ intervalında dəyişir.

H_β xətti həmişə absorbsiya komponenti formasında müşahidə olunur. Bu xətdə $\dot{G}$ sürəti $-136\text{km/s} \div -84\text{km/s}$ intervalında dəyişir.

H_α xətti profilində yaranan D^* komponentində $\dot{G}$ sürəti üçün ən dayanıqlı period $p=285.7^d$ gün olduğu tapılmışdır.

H_α və H_β xətti profillərinin absorbsiyalarında uyğun spektral parametrlərin dəyişməlikləri arasında aşağıdakı şəkildə münasibətlər aşkar olunmuşdur

H_α - da $\Delta\lambda$ və r_v üçün

$$\max(\Delta\lambda) / \min(\Delta\lambda) \sim 1.3,$$

$$\max(r_v) / \min(r_v) \sim 1.7 \text{ olmaqla nisbətən zəif dəyişməlik bağı verir.}$$

H_β xətti üçün də bu nisbətlər

$$\max(\Delta\lambda) / \min(\Delta\lambda) \sim 1.5,$$

$\max(r_v) / \min(r_v) \sim 1.5$ olmaqla yenə də nisbətən zəif dəyişkənlik bağ verir.

H_α –da $\Delta\lambda_{1/2}$ və W_λ üçün isə

$\max(\Delta\lambda_{1/2}) / \min(\Delta\lambda_{1/2}) \sim 2.3$

$\max(W_\lambda) / \min(W_\lambda) \sim 2.5$ olmaqla nisbətən güclü dəyişkənlik bağ verir.

H_β xətti üçün də bu nisbətlər

$\max(\Delta\lambda_{1/2}) / \min(\Delta\lambda_{1/2}) \sim 2.3$

$\max(W_\lambda) / \min(W_\lambda) \sim 2.1$ olmaqla burada da nisbətən güclü dəyişkənlik bağ verir.

H_α və H_β üçün uyğun nisbətlər bir-birilərinə çox yaxındır və bəzi hallarda isə üst-üstə düşür. Yəni dəyişkənliyin belə növündə də korrelyasiya vardır.

Absorbsiyadan fərqli olaraq H_α -nın emissiya komponentində yalnız xəttin r_v qalıq intensivliyi nəzərəcarpacaq dəyişkənliyə məruz qalmır. Lakin $\Delta\lambda$, $\Delta\lambda_{1/2}$ və W_λ spektral parametrləri üçün isə uyğun (max/min) nisbətlər $\sim 2.0 \div \sim 2.5$ olmaqla nisbətən güclü dəyişkənlik bağ verir.

H_β xətti profilinin qırmızı qanadında zəif emissiya komponenti yaranmışdır.

H_α və H_β xətti profillərində Güəsürətlərinin və digər spektral parametrlərin qiymətlərinin dəyişməsi və H_α -nın absorbsiya profilində müşahidə olunan diskret udulma komponentlərin yaranması, kontur boyunca sürüşməsi və yox olması ifratnəhəng ulduz atmosferlərinin aşağı qatlarında bağverən qeyri-radial pulsasiyaların nəticəsidir.

1. С.К.Зейналов, *Наблюдательные доказательства подтверждающие неустойчивость атмосфер звезд высокой светимости*, *ŞAR Sirkulyarı*, **110** (2005) 62-69.
2. Mc.Kellar.A, *Spectroscopic variations of P Cyg-type stars*, *Publ. American Astron. Soc*, **9** (1939).
3. H.A.Abt, *The variability of supergiants*, *Astrophys. J.*, **126** (1957) 138-151.
4. J.D.Rosendhal, G. Wegner, *Spectrum Variations in A-Type supergiants*, *Ap.J*, **162** (1970) 547-556.
5. И.М.Копылов, *Красные гиганты и сверхгиганты*, *Изв. САО*, **2** (1970) 42-50.
6. С.Аydin, *Atmospheres of A-type supergiants*, *Astr. And Ap.*, **19** (1972) 369-375.
7. Г.И.Аббасов, С.К.Зейналов, Е.Л.Ченцов, *Атмосфера сверхгиганта 6 Cas. II. Скорости турбулентных движений, электронная плотность и ускорение силы тяжести*, *Изв.САО*, **5** (1973) 81-88.
8. E.L.Chentsov, U.Heber and C.S.Jeffery (eds.), *Atmospheres of Early-Type Stars, Lecture Notes Phys*, **401** (1992) 128-155.
9. R.A.Bartaya, K.B.Chargeishvili, E.L.Chentsov and Z.U.Shkhagoshova, *Hypergiant 6 Cas and association Cas OB5*, *Bull. Special Astrophys. Obs*, **38** (1994) 103-118.
10. В.В.Соколов, Е.Л.Ченцов, *Атмосфера сверхгиганта 6 Cas, III. Дифференциальные сдвиги линий и аномалии профилей как проявление расширения атмосферы и потери ею вещества*, *Изв. САО*, **18** (1984) 8-28.
11. E.L.Chentsov, *Unstable wind of 6 Cassiopeae*, *Astroph. And Space Science*, **232** (1995) 217-232.
12. С.К.Зейналов, Я.М.Магеррамов, И.М.Мамедова, А.Г.Бабаев, *Исследование профиля линии H_α в спектре звезды 6 Cas (A3Ia)*, *Transactions of Azerbaijan Academy of Sciences, Series of Physical-mathematical and Technical sciences, Physics and Astronomy*, **XXVIII №2** (2008) 163-166.
13. Х.М.Микаилов, В.М.Халилов, И.А.Алекберов, *Эшелле-спектрометр фокуса Кассегрена 2-м телескопа ШАО НАН Азербайджана*, *ŞAR Sirkulyarı*, **109** (2005) 21-29.

14. Г.А.Галазутдинов, *Система обработки эшелле-спектров DECH-20, Препринт САО РАН, 92* (1992).

15. К.де Ягер, *Звезды наибольшей светимости, Москва, Мир, (1984), 493с.*

THE SPECTROSCOPIC INVESTIGATION OF VARIABILITY IN THE ATMOSPHERE OF 6 CAS STAR

Y.M.MAHARRAMOV, I.M.MAMMADOVA, A.Sh.BALOQLANOV

The results of variations of the radial velocities and other spectral parameters and changing of the structure of profiles H_{α} and H_{β} lines in the spectra of 6 Cas star have been presented. It has been found that the discrete components (DAC) are formed, displaced and then disappear in the profiles of absorption of H_{α} line. By means of Fourye analysis for variability radial velocities in the discrete components have been found 24.1^d and 285.7^d periods.

ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЙ ПЕРЕМЕННОСТИ В АТМОСФЕРЕ ЗВЕЗДЫ 6 CAS

Я.М.МАГЕРРАМОВ, И.М.МАМЕДОВА, А.Ш.БАЛОГЛАНОВ

Приведены результаты изменений структуры профилей, лучевых скоростей и других параметров линий H_{α} и H_{β} в спектрах звезды 6 Cas. Выявлено, что в профиле абсорбционной компоненты линии H_{α} наблюдаются дискретные компоненты (ДАК), которые со временем смещают в пределах профиля, а затем исчезают. С помощью Фурье анализа найдены периоды изменения лучевых скоростей дискретных компонент 24.1^d и 285.7^d.

Редактор:Ю.Исмаилов

MÜNDƏRİCAT

TlFeS ₂ kristalının elektron quruluşunun ferromaqnit fazada hesablanması Z.A.Cahangirli, Kojiro Mimura, Kazuki Wakita, Yonggu Shim, H.S.Orucov, N.T.Məmmədov.....	3
Səthin üzərində adsorbat layları olduğu halda AQM təsvirlərinin formalaşmasının xüsusiyyətləri S.C.Ələkbərov.....	8
Mikro-pikselli selvari fotodiodların radiasiyaya davamlılığının tədqiqi F.İ.Əhmədov, R.S.Mədətov, Z.İ.Sadiqov, Y.M.Mustafayev.....	14
TlSe kristalının qəfəs dinamikası V.N.Cəfərova, H.S.Orucov.....	18
Ge _{1-x} Si _x kristal təbəqələrinin elektrik xassələrinin xüsusiyyətləri H.Mehdavi, R.S.Mədətov, <u>S.M.Abbasov</u> , Y.M.Mustafayev, Ü.F.Fərəcova.....	31
ε – GaSe kristalının fonon spektrinin ilk prinsiplərdən hesablanması Z.A.Jahangirli.....	36
Qamma kvantları ilə şüalandırılmış Pb _{1-x} Mn _x Te epitaksial təbəqələrinin səthinin AQM- tədqiqi T.İ.Kərimova, H.R.Nuriyev, <u>S.M.Abbasov</u> , M.Ə.Ramazanov.....	42
EuF ₃ aşqarlı Se ₉₅ As ₅ şüşəvari halkogenid yarımqeçiricinin elektrikkeçirməsinə güclü elektrik sahəsinin təsiri S.N.Gəribova, A.İ.İsayev, S.İ.Mehdiyeva, V.Z.Zeynalov.....	45
Lazer şüalarının təsiri ilə silisium kristallarında elektron – dəşik səpilməsi A.H.Kazimzadə, A.M.Əliyeva, V.M.Salmanov, İ.M.Əliyev, A.A.Salmanova.....	53
İndium monoselenidi kristallarında induksiyanmış aşqar fotoqeçiriciliyin xüsusiyyətləri Ə.Ş.Abdinov, R.F.Babayeva, R.M.Rzayev.....	59
5keV enerjili indium ionları ilə şüalandırılmış Hg _{1-x} Cd _x Te əsasında fotodiodlar N.C.İsmayilov, E.K.Hüseynov, İ.S.Həsənov, S.M.Guliyev, R.Muxtarova.....	67
Ga _{0.83} In _{0.83} Fe _{0.34} S ₃ bərk məhlul kristallarının quruluşu və optiki xassələri C.Hasani Barbaran, Q.H.Hüseynov, Y.İ.Aliyev, G.M.Ağamirzəyeva.....	71
Cu ₅ SmSe ₄ birləşməsində kinetik xassələrin xüsusiyyəti R.N.Rəhimov, Y.R.Əliyeva, Z.İ.Süleymanov, Q.Q.Hüseynov.....	78
FeIn ₂ S ₄ –ün dielektrik nüfuzluğunun temperaturdan və dəyişən elektrik cərəyanının tezliyindən asılılığı N.N.Niftiyev, O.B.Tağıyev, F.M.Məmmədov, M.B.Muradov, Ü.F.Qasimov, F.A.Kazımova.....	83
Alkanların müxtəlif temperaturalarda buxarlanma istiliyi Ə.H.Əhmədov.....	89
Kükürd vakansiyalarının heksaqonal TlInS ₂ kristallarının fotoqeçiriciliyinə təsiri R.S.Mədətov, A.İ.Nəcəfov, M.Ə.Məmmədov.....	93
EuF ₃ aşqarlı Se ₉₅ As ₅ halkogenid şüşəvari yarımqeçiricisində injeksiya cərəyanları A.İ.İsayev, S.İ.Mehdiyeva, S.N.Gəribova, V.Z.Zeynalov, M.M.Seyidov.....	98
TlGaSe ₂ -TlCrSe ₂ (Se ₂) sistemlərində faza nisbətləri və fazaların maqnetodielektrik xassələri R.G.Vəliyev, Mir-Həsən Yu.Seyidov, E.M.Kərimova, R.Z.Sadıxov, F.M.Seyidov, Yu.G.Əsədov, N.Z.Həsənov.....	106
Cd-Ba-Cu-O sistemində faza keçidlərinin yayılması V.M.Əliyev.....	113
Nanoölçülü dəmir oksidləri və su, su-polietilen-qlikol əsaslı maqnit mayelərdə işığın dinamik səpilməsi və elektron maqnit rezonansı E.Ə.Məsimov, E.H.İsmayilov, Ç.R.Fərəcov.....	118

Tellur artıqlığının və termik işlənmənin qurğuşun tellurid monokristallarının elektrik xassələrinə təsiri	
G.Z.Bağiyeva, G.C.Abdinova, N.B.Mustafayev.....	122
77–300K temperatur intervalında $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ yarımmetal xəlitəsinin fermi enerjisi	
E.P.Yüzbaşov, B.A.Tahirov, M.A.Əkbərov.....	129
$\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ epitaksial təbəqələrinin səthinin morfologiyası və onların əsasında fətohəssas p-n strukturlar	
H.R.Nuriyev, A.M.Nəzərov, N.V.Fərəcov, S.S.Fərzəliyev, R.M.Sadıgov, V.R.Əliyeva.....	136
Qamma kvantlarla şüalanmış indium fosfid kristallarının elektrofiziki xassələri	
M.İ.Əliyev, Ş.Ş.Rəşidova, M.A.Hüseynli, İ.M.Əliyev.....	140
Təkdirarlı yarımkeçirici nanoboruda polyaronun effektiv kütləsi	
O.Z.Ələkbərov, S.M.Seyid-Rzayeva, S.S.Hüseynova.....	143
AgGaSe_2 nanoqalınlıqlı amorf təbəqəsinin kristallaşma kinetikasi	
A.Ç.Məmmədova, C.İ.İsmayilov.....	150
Ag_2Te kristalında yükdaşıyıcıların defektlərdən səpilməsi	
F.F.Əliyev, R.A.Həsənova, E.R.Həsənov, Q.P.Paşayev.....	154
IrSi–Si kontaktı əsasında fətohəssas element	
E.Ə.Kərimov.....	158
İnşaat gipsinin diferensial-termiki tədqiqatları	
E.H.Bəşirov, N.A.Eyyubova.....	162
Yüksəktemperaturlu rentgenoqrafik metod vasitəsilə $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ və $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$ -də polimorf çevrilmələrin tədqiqi	
V.İ.Nəsirov, A.F.Həziyeva, Y.Q.Əsədov, Q.H.Hüseynov.....	167
Qismən anizotrop altlığa yerləşdirilən düzbucaqlı anizotrop dalğaötürücüsünün modelləşdirilməsi	
İ.C.İslamov, M.B.Cəfərzadə.....	173
RY-TAU ulduzunun spektr və parlaqlığının tədqiqi	
N.Z.İsmayilov, P.N.Shustarev, B.N.Rüstəmov, H.N.Adıgözəlzadə.....	179
HD223385 (6 CAS A3Ia) ulduzu atmosferində dəyişkənliklərin spektroskopik tədqiqi	
Y.M.Məhərrəmov, İ.M.Məmmədova, Ə.Ş.Baloğlanov.....	193

CONTENTS

Calculation of electronic structure of TlFeS_2 crystal in ferromagnetic phase Z.A.Cahangirli, Kojiro Mimura, Kazuki Wakita, Yonggu Shim, H.S.Orudjev, N.T.Mamedov.....	3
AFM images formation peculiarities in the presence of layers of a surface adsorbate S.D.Alekperov.....	8
Investigation of radiation hardness of micro-pixel avalanche photodiodes F.I.Ahmadov, R.S.Madatov, Z.Y.Sadygov, Y.M.Mustafaev.....	14
Lattice dynamics of TlSe crystal V.N.Jafarova, G.S.Orudzhev.....	18
Features of electric properties of crystal layers $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ N.Mehdevi, R.S.Madatov, <u>Sh.M.Abbasov</u> , Y.M.Mustafaev, I.F.Farajova.....	31
AB INITIO calculation of phonon spectra of $\varepsilon - \text{GaSe}$ Z.A.Jahangirli.....	36
AFM research of gamma-kvphants irradiated $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ epitaxial films surface T.I.Kerimova, N.R.Nuriyev, <u>Sh.M.Abbasov</u> , M.A.Ramazanov.....	42
Influence of strong electric field on the current flow in $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ chalcogenide glass-like semiconductor, containing EuF_3 rare-earth atoms impurities S.N.Garibova, A.I. Isayev, S.I.Mekhtiyeva, V.Z.Zeynalov.....	45
Electron-hole scattering in silicon at laser excitation A.G.Kyazym-Zade, A.M.Alieva, V.M.Salmanov, I.M.Aliev, A.A.Salmanova.....	53
Features of induced impurity photoconductivity in crystals of indium monoselenides A.Sh.Abdinov, R.F.Babayeva, R.M.Rzayev.....	59
Photodiodes on the basis OF $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ obtained by irradiation of 5keV indium ions N.D.İsmayilov, E.K.Guseynov, İ.S.Gasanov, S.M.Guliyev, R.Mukhtarova.....	67
Synthesis, structure investigation and optical properties of $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ compound J. Hasani Barbaran, G.G.Guseinov, Y.I.Aliyev, G.M.Agamirzeyeva.....	71
Features of kinetic properties of Cu_5SmSe_4 compound R.N.Rahimov, Y.R.Aliyeva, Z.I.Suleymanov, G.G.Guseynov.....	78
Dependence of the dielectric constant of FeIn_2S_4 on frequency of alternating electric currents and temperature N.N.Niftiyev, O.B.Taghiyev, F.M.Mammadov, M.B.Muradov, U.F.Gasimov, F.A.Kazimova.....	83
Heat of vaporization of alkanes at different temperatures A.H.Ahmadov.....	89
Influence of sulfur vacancies on the photoconductivity of hexagonal crystals TlInS_2 R.S.Madatov, A.I.Najafov, M.A.Mamedov.....	93
The injection currents of $\text{Se}_{95}\text{As}_5$ glass-like semiconductor, containing EuF_3 impurity A.I.Isayev, S.I.Mekhtiyeva, S.N.Garibova, V.Z.Zeynalov, M.M.Seyidov.....	98
Phase relations and the magneto-dielectric properties of phases in the systems of TlGaSe_2 - TlCrS_2 (Se_2) R.G.Veliyev, Mir-Gasan Yu.Seyidov, E.M.Kerimova, R.Z.Sadykhov, F.M.Seyidov, Yu.G.Asadov, N.Z.Gasanov.....	106
The diffusion of the phase transition in the Cd-Ba-Cu-O system V.M.Aliev.....	113
Dynamic light scattering and electron magnetic resonance of magnetic liquids based on nanosized iron oxide particles in polyethylene glycol/water solution E.A.Masimov, E.G.Ismailov, C.R.Faradzhev.....	118

Influence of tellurium excess and heat treatment on electrical properties on the lead telluride single crystals	
G.Z.Bagiyeva, G.D.Abdinova, N.B.Mustafayev.....	122
Fermi energy of the semimetallic alloy of $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ in the temperature range of 77–300K	
E.P.Yuzbashov, B.A.Tairov, M.A.Akberov.....	129
Surface morphology of $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ epitaxial films and photosensitive p-n structures on their basis	
I.R.Nuriyev, A.M.Nazarov, N.V.Faradjev, S.S.Farzaliyev, R.M.Sadigov, V.R.Aliyeva.....	136
Electrophysical properties of indium phosphide irradiated by gamma quanta	
M.I.Aliyev, Sh.Sh.Rashidova, M.A.Quseynli, I.M.Aliyev.....	140
Effective polaron mass in single-walled semiconducting nanotubes	
O.Z.Alekperov, S.M.Seyid-Rzayeva, S.S.Huseynova.....	143
Crystallization kinetics of amorphous nanothickness AgGaSe_2 films	
A.Ch.Mamedova, D.I.Ismailov.....	150
Carrier scattering by defects in Ag_2Te	
F.F.Aliyev, R.A.Hasanova, E.R.Hasanov, Q.P.Pashayev.....	154
Photosensitive element on the basis of irsi-Si contact	
E.A.Kerimov.....	158
The differential thermal exploration of activated gypsum plaster	
E.H.Bashirov, N.A.Eyyubova	162
Research of polymorphic transformations in $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ and $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$ by method of high-temperature X-ray	
V.I.Nasirov, A.F.Hazieva, Yu.G.Asadov, Q.Q.Quseinov.....	167
Modelling of the anisotropic rectangular waveguide, partially loaded in the anisotropic substrate	
I.J.Islamov, M.B.Jafarzade.....	173
Investigation Of Spectrum And Brightness RY TAU	
N.Z.Ismailov, P.N.Shustarev, B.N.Rustamov, H.N.Adigozalzade.....	179
The spectroscopic investigation of variability in the atmosphere of 6 CAS STAR	
Y.M.Maharramov, I.M.Mammadova, A.Sh.Baloqlanov.....	193

СОДЕРЖАНИЕ

Расчет электронной структуры кристалла TlFeS_2 в ферромагнитной фазе З.А.Джахангирли, Коджиро Мимура, Казуки Вакида, Енг Шим, Г.С.Оруджев, Н.Т.Мамедов.....	3
Особенности формирования АСМ-изображений при наличии слоев поверхностного адсорбата С.Д.Алекперов.....	8
Исследование радиационной стойкости микро-пиксельных лавинных фотодиодов Ф.И.Ахмедов, Р.С.Мадатов, З.И.Садиков, Ю.М.Мустафаев.....	14
Динамика решетки кристалла TlSe В.Н.Джафарова, Г.С.Оруджев.....	18
Особенности электрических свойств кристаллических слоев $\text{Ge}_{1-x}\text{Si}_x$ Н.Мехдеви, Р.С.Мадатов, Ш.М.Аббасов, Ю.М.Мустафаев, И.Ф.Фараджова.....	31
АВ INITIO расчет фононного спектра $\varepsilon - \text{GaSe}$ З.А.Джахангирли.....	36
АСМ-исследование поверхности облученных гамма-квантами эпитаксиальных пленок $\text{Pb}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ Т.И.Керимова, Н.Р.Нуриев, Ш.М.Аббасов, М.А.Рамазанов.....	42
Влияние сильного электрического поля на токопрохождение в халькогенидном стеклообразном полупроводнике $\text{Se}_{95}\text{As}_5$, содержащем примеси редкоземельных атомов EuF_3 С.Н.Гарибова, А.И.Исаев, С.И.Мехтиева, В.З.Зейналов.....	45
Электронно-дырочное рассеяние в кремнии при лазерном возбуждении А.Г.Кязым-Заде, А.М.Алиева, В.М.Салманов, И.М.Алиев, А.А.Салманова.....	53
Особенности индуцированной примесной фотопроводимости в кристаллах моноселенида индия А.Ш.Абдинов, Р.Ф.Бабаева, Р.М.Рзаев.....	59
Фотодиоды на основе $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$, полученные облучением ионами индия с энергией 5 кэВ Н.Д.Исмаилов, Э.К.Гусейнов, И.С.Гасанов, Ш.М.Кулиев, Р.Мухтарова.....	67
Исследование структуры и оптические свойства кристаллов твердых растворов $\text{Ga}_{0.83}\text{In}_{0.83}\text{Fe}_{0.34}\text{S}_3$ Дж.Хасани Барбаран, Г.Г.Гусейнов, Ю.И.Алыев, Г.М.Агамирзоева.....	71
Особенности кинетических свойств соединения Cu_5SmSe_4 Р.Н.Рагимов, Е.Р.Алиева, З.И.Сулейманов, К.Г.Гусейнов.....	78
Зависимость диэлектрической проницаемости FeIn_2S_4 от частоты переменного электрического тока и температуры Н.Н.Нифтиев, О.Б.Тагиев, Ф.М.Мамедов, М.Б.Мурадов, У.Ф.Гасымов, Ф.А.Казымова.....	83
Теплоты парообразования алканов при различных температурах А.Г.Ахмедов.....	89
Влияние вакансий серы на фотопроводимость гексагональных кристаллов TlInS_2 Р.С.Мадатов, А.И.Наджафов, М.А.Мамедов.....	93
Инжекционные токи в халькогенидном стеклообразном полупроводнике $\text{Se}_{95}\text{As}_5$, содержащем примеси EuF_3 А.И.Исаев, С.И.Мехтиева, С.Н.Гарибова, В.З.Зейналов, М.М.Сеидов.....	98
Фазовые соотношения и магнетодиэлектрические свойства фаз в системах TlGaSe_2 - $\text{TlCrS}_2(\text{Se}_2)$ Р.Г.Велиев, Мир-Гасан Ю.Сеидов, Э.М.Керимова, Р.З.Садыхов,	

Ф.М.Сеидов, Ю.Г.Асадов, Н.З.Гасанов.....	106
Размытие фазовых переходов в системе Cd-Ba-Cu-O	
В.М.Алиев.....	113
Динамическое рассеяние света и электронный магнитный резонанс магнитных жидкостей на основе наноразмерных частиц оксидов железа в растворе полиэтиленгликоль/вода	
Э.А.Масимов, Э.Г.Исмаилов, Ч.Р.Фараджев.....	118
Влияния избытка теллура и термической обработки на электрические свойства монокристаллов теллурида свинца	
Г.З.Багиева, Г.Д.Абдинова, Н.Б.Мустафаев.....	122
Энергия Ферми полуметаллического сплава $\text{Bi}_{0.94}\text{Sb}_{0.06}$ в области температур 77–300K	
Э.Р.Юзбашов, Б.А.Таиров, М.А.Акперов.....	129
Морфология поверхности эпитаксиальных пленок $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Se}$ и фоточувствительные р-п структуры на их основе	
И.Р.Нуриев, А.М.Назаров, Н.В.Фараджев, С.С.Фарзалиев, Р.М.Садыгов, В.Р.Алиева.....	136
Электрофизические свойства облученного гамма квантами фосфида индия	
М.И.Алиев, Ш.Ш.Рашидова, М.А.Гусейнли, И.М.Алиев.....	140
Эффективная масса полярона в полупроводниковой одностенной нанотрубке	
О.З.Алекперов, С.М.Сеид-Рзаева, С.С. Гусейнова.....	143
Кинетика кристаллизации нанотолщинных аморфных пленок AgGaSe_2	
А.Ч.Мамедова, Д.И.Исмаилов.....	150
Рассеяние носителей заряда на дефектах в Ag_2Te	
Ф.Ф.Алиев, Р.А.Гасанова, Е.Р.Гасанов, Г.П.Пашаев.....	154
Фоточувствительный элемент на основе контакта IrSi-Si	
Э.А.Керимов.....	158
Дифференциально-термические исследования активированного строительного гипса	
Э.Г.Баширов, Н.А.Эюбова.....	162
Исследование полиморфных превращений в $\text{Rb}_{0.975}\text{Cs}_{0.025}\text{NO}_3$ и $\text{Rb}_{0.950}\text{Cs}_{0.05}\text{NO}_3$ методом высокотемпературной рентгенографии	
В.И.Насиров, А.Ф.Хазиева, Ю.Г.Асадов, Г.Г.Гусейнов.....	167
Моделирование анизотропного прямоугольного волновода, частично внедренного в анизотропную подложку	
И.Дж.Исламов, М.Б.Джафарзаде.....	173
Исследование спектра и блеска RY TAU	
Н.З.Исмаилов, П.Н.Шустарев, Б.Н.Рустамов, А.Н.Адыгезалзаде.....	179
Исследования спектроскопической переменности в атмосфере звезды 6 CAS	
Я.М.Магеррамов, И.М.Мамедова, А.Ш.Балогланов.....	193