Uzbek Journal of Physics
Volume 21 2019 Number 5

СОДЕРЖАНИЕ

С. ДЖУМАНОВ, У.Т. КУРБАНОВ. Возможные механизмы локализации носителей и металл-диэлектрик переходы в дырочно-легированных купратах ……..... 273

В.Г. СТЕЛЬМАХ, И.Д. ЯДГАРОВ, А.Н. УЛУКМУРАДОВ, У.Б. УЛЖАЕВ. Невалентное взаимодействие низших фулеренов с графеном ……. 280

С.Е. МАКСИМОВ, Х.Б. АШУРОВ, М.М. АДИЛОВ, С.Ф. КОВАЛЕНКО, О.Ф. ТУКФАТУЛЛИН, Ш.Т. ХОЖИЕВ. Структуры кластеров $Si_nO_m^+$, распыленных ионной бомбардировкой …… 283

Б.Е. УМИРЗАКОВ, Ё.С. ЭРГАШОВ. Экспериментальное и теоретическое исследование влияния бомбардировки ионами Ar^+ на спектр валентных электронов монокристалла Si(111) ….. 293

Н.Ю. ТУРАЕВ, М.К. КАРИМОВ, М.К. КУРБАНОВ, М.У. ОТАБОЕВ, У.О. КУТЛИЕВ. Исследование дефектной поверхности InP(001) методом малоуглового рассеяния ионов .. 299

Б.М. АБДУРАХМАНОВ, М.М. АДИЛОВ, Х.Б. АШУРОВ, М.Ш. КУРБАНОВ. Гранулированный кремний как перспективный материал для создания преобразователей тепловой энергии 303

В.Н. АРУСТАМОВ, Р.Х. АШУРОВ, В.М. РОТШТЕЙН, Х.Б. АШУРОВ, И.Х. ХУДАЙКУЛОВ. Аналитический контроль качества очистки поверхности при ионном, ионно-плазменном воздействии …… 310

А. ВАСИДОВ, С.О. ВАСИДОВА. Применение трековых детекторов CR-39 для измерения объемной активности и скорости эксхаляции радона-222 в домах Ташкента ……. 318

ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ

Р. КУРБАНОВ, З.А. ИСАХАНОВ, И.О. КОСИМОВ, А.С. ХАЛМАТОВ. Влияние плотности тока на выход многоатомных наночастиц при распылении металлов ionами инертных газов …….. 325

Ш.Х. ДАЛИЕВ, М.Б. БЕКМУРАТОВ. Влияние примеси иттербия на генерационные характеристики МДП-структур …….. 329

Ш.Б. УТАМУРАДОВА, З.О. ОЛИМБЕКОВ. Дефектообразование при низкотемпературном отжиге кремния, легированного кобальтом …….. 332

ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ …….. 335

Uzbek Journal of Physics

Volume 21 2019 Number 5

CONTENTS

S. DZHUMANOV, U.T. KURBANOV. Possible mechanisms of carrier localization and metal–insulator transitions in hole-doped cuprates 273

V.G. STELMAKH, I.D. YADGAROV, A.N. ULUKMURADOV, U.B. ULJAEV. Nonvalent interaction of lower fullerenes with grapheme ……... 280

S.E. MAKSIMOV, KH.B. ASHUROV, M.M. ADILOV, S.F. KOVALENKO, O.F. TUKFATULLIN, SH.T. KHOJIEV. Structures of $Si_nO_m^+$ clusters sputtered by ion bombardment …… 283

B.E. UMIRZAKOV, Y.S. ERGASHOV. Experimental and theoretical investigation of influence of bombardment by Ar^+ ions on valence electron spectrum in monocrystal Si(111) …… 293

N.YU. TURAEV, M.K. KARIMOV, M.K. KURBANOV, M.U. OTABOEV, U.O. KUTLIEV. Investigation of defective surface of InP(001) by the method of ion small angle scattering …….. 299

B.M. ABDURAKHMANOV, M.M. ADILOV, KH.B. ASHUROV, M.SH. KURBANOV. The granular silicon as a perspective material for the manufacture of thermal energy converters …….. 303

V.N. ARUSTAMOV, R.KH. ASHUROV, V.M. ROTCHTEIN, KH.B. ASHUROV, I.KH. KHUDAYKULOV. Analyitic control of cleaning the surface at ion and ion-plazma influence …… 310

A. VASIDOV, S.O. VASIDOVA. Using of the CR-39 track detectors for measurements of radon-222 volume activity and exhalation rate in houses of Tashkent city …….. 318

LETTERS TO EDITOR

R. KURBANOV, Z.A. ISAKHANOV, I.O. KOSIMOV, A.S. KHALMATOV. Influence of current density on yield of multiatomic nanoparticles at scattering of metals by inert gas ions …..... 325

SH.KH. DALIEV, M.B. BEKMURATOV. Influence of Yb impurities on generation characteristics of MIS-structures ……. 329

SH.B.UTAMURADOVA, Z.O. OLIMBEKOV. Defect formation in doped with cobalt silicon at low-energy annealing …… 332

INFORMATION FOR AUTHORS …… 335

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.273-279

POSSIBLE MECHANISMS OF CARRIER LOCALIZATION AND METAL–INSULATOR TRANSITIONS IN HOLE-DOPED CUPRATES

S. Dzhumanov, U.T. Kurbanov

Institute of Nuclear Physics, Uzbekistan Academy of Sciences, 100214, Ulughbek, Tashkent, Uzbekistan, dzhumanov@inp.uz

(Received 14.03.2019)

Биз бир жинсли бўлмаган тешикли-легирланган купратларда заряд ташувчиларнинг турғунлашиш механизмларини ва металл-диэлектрик ўтишларни (МДЎ) ўргандик. Легирланган купратларнинг диэлектрик ҳолати заряд ўтказувчи тирқишли легирланмаган купратлардаги Мотт диэлектрикидан фарқ қилиши кўрсатилди. Легирловчилари киришмалар ва заряд ташувчилар бўлган бир жинсли бўлмаган купратларда зарядларнинг бўлиниши ва тартибланиши заряд ташувчиларга тўйинган ва тўйинмаган соҳалар (страйплар) ҳосил бўлишига олиб келади. Зарядларнинг тартибланиши бир жинсли бўлмаган юқори ҳароратли ўта ўтказувчан купратларда турғунлашган заряд ташувчиларнинг турли хил ўтапанжаралари ва энергетик зоналари ҳосил бўлишига олиб келади. Биз тирқишдаги киришмали ва поляронли ҳолатлар (зоналар) легирлашнинг критик даражаларида металл ҳолатга ўтишини кўрсатдик. Легирланган купратларда МДЎ рўй бериши шартларини топишда ноаниқликлар тамойилидан фойдаландик. Бу МДЎнинг қўлланилиш чегаралари аниқланди. Натижалар купратлардаги мавжуд эксперимент натижалари билан мос келади.

Изучены возможные механизмы локализации носителей в неоднородных дырочно-легированных купратах и металл-диэлектрик переходы (МДП) в них. Показано, что диэлектрическое состояние легированных купратов отличается от состояния моттовского диэлектрика нелегированных купратов, характеризующихся щелью переноса заряда. Неоднородности, обусловленные легирующими примесями и носителями, способствуют разделению и упорядочению зарядов в виде трехмерных (3D), насыщенных и обедненных носителями, полос (страйпов). Специфическое упорядочение заряда приводит к образованию различных сверхрешеток и энергетических зон локализованных носителей в неоднородных высокотемпературных сверхпроводящих купратах. Показано, что примесные и поляронные состояния (зоны) превращаются в металлические состояния на некоторых критических уровнях легирования. Мы используем соотношение неопределенности для получения конкретных условий для МДПов в легированных купратах. Определены пределы применимости этих МДПов в купратах. Наши результаты согласуются с существующими экспериментами на основе La и других купратов.

We study the possible mechanisms of carrier localization and metal-insulator transitions (MITs) in inhomogeneous hole-doped cuprates. We show that the insulating state of doped cuprates is different from the Mott insulating state of undoped cuprates characterized by the charge-transfer gap. The dopant- and carrier-driven inhomogeneities favor the charge segregation and ordering in the form of a three-dimensional network of carrier-rich and carrier-poor stripes. The specific charge ordering results in the formation of different superlattices and energy bands of localized carriers in inhomogeneous high-T_c cuprates. We argue that the in-gap impurity and polaronic states (bands) develop into metallic states at some critical doping levels. We use the uncertainty relation to obtain the specific conditions for the MITs in doped cuprates. The applicability limits of these MITs in cuprates are clarified. Our results are in good agreement with the existing experiments on La-based and other cuprates.

I. INTRODUCTION

Understanding the mechanisms of carrier localization, metal-insulator transitions (MITs) and suppression of high-T_c superconductivity in hole-doped cuprates remains one

of the central issues in condensed matter physics. In the undoped cuprates, the carrier localization is caused by the strong on-site Coulomb repulsion and the Mott-Hubbard model is believed appropriate to describe the MITs in the cuprates [1]. As the doping level increased towards the underdoped level, the hole-doped cuprates become unusual metals and the importance of electron correlations diminishes [2] and other mechanisms may play a major role in carrier localization and MITs in these systems. For lightly doped cuprates within the insulating antiferromagnetic (AF) phase, the electron correlation is likely to dominate the carrier localization; when the underdoped region is approached, it is not obvious which process will dominate. In hole-doped cuprates, the phenomena of carrier localization and MITs seem to be much more complicated by carrier-dopant (defect)-lattice or carrier-lattice interaction effects, which usually were ignored in the existing theoretical models. In reality, there are important unexplained differences between the MITs observed in lightly doped [1, 3], underdoped [4, 5] and optimally doped [6] cuprates. Another unresolved issue in the physics of high-T_c cuprates is the role of the electronic inhomogeneity and charge ordering in the phase separation in the form of alternating stripes associated with the two distinct electronic phases (i.e. metallic/superconducting and insulating phases) [7-10], which is intimately related to carrier localization and MITs in these materials. In this work, we address the carrier localization and MITs by providing important new insight into the physics of these phenomena in inhomogeneous hole-doped cuprates.

II. SPECIFIC CHARGE ORDERING AND FORMATION OF DIFFERENT SUPERLATTICES

The hole-doped cuprates are inhomogeneous systems (where the dopants and charge carriers are distributed inhomogeneously) and the underdoped cuprates are more inhomogeneous than overdoped ones [10]. The dopant-driven and carrier-driven inhomogeneities may produce regions with different doping levels or with spatially varying local density of charge carriers. The doped cuprates have a rich phase diagram and their metallic and superconducting states are quite different from those of conventional metals and superconductors [11-14]. The insulating state of these materials is also substantially different from that of undoped cuprates [13, 15]. Instead of strong electron correlations (i.e., on-site Coulomb interactions), which play a dominating role only in undoped cuprates and drive these systems into a CT-type Mott insulating state [16], the carrier-defect-phonon and carrier-phonon interactions and the electronic inhomogeneities play an important role in doped cuprates and are responsible for the carrier localization and pairing and the charge segregation, which may manifest itself via local phase separation and stripe formation (i.e. the charge carriers form metallic stripes, «rivers of charge carriers» [13], separated by insulating stripes). In particular, in doped high-T_c cuprates the inhomogeneous spatial distribution of charge carriers leads to their segregation into carrier-rich and carrier-poor regions. Whereas the short- and long-range carrier-defect-phonon and carrier-phonon attractive interactions may dominate and give rise to charge aggregation in carrier-rich metallic regions together with charge depletion in spatially separated carrier-poor regions with no mobile carriers. In high-T_c cuprates, the local inhomogeneity and the competitions between the kinetic energy, the above attractive interactions and the long-range Coulomb interaction produce nanoscale self-organized structures called stripes. Further, the anisotropy of the dielectric constants (ε_∞ – high frequency dielectric constant and ε_0 – static dielectric constant) and the smallness of

η ($=\varepsilon_\infty/\varepsilon_0$) in the cuprates favor such phase separation into alternating carrier-rich and carrier-poor regions. As the doping level increases towards underdoped regime, specific charge ordering in the form of a 3D network of dynamic (metallic) and static (insulating) stripes takes place in these regions, where distinctly different superlattices and energy bands of dopants and self-trapped carriers (intrinsic large polarons) are formed at their inhomogeneous spatial distribution. In particular, the hydrogenic impurity centers (impurities with loosely bound quasi-free carriers or large polarons) and extrinsic large polarons (or impurities with tightly bound large polarons) are assumed to form the superlattices with the lattice constant a_I and coordination number z. The charge ordering in carrier-poor and carrier-rich domains results in the formation of simple cubic, body-centered cubic and face-centered cubic superlattices with coordination numbers z = 6, 8 and 12, respectively, and the formation of different impurity bands in the CT gap of the cuprates. In the tight-binding approximation the widths of the impurity bands can be determined from the relation

$$W_I = 2zJ\,, \tag{1}$$

where J is the hopping integral between nearest-neighbor impurity centers.

For the case of the hydrogenic impurity centers, the hopping integral in Eq. (1) may be approximated as [17]

$$J = \frac{e^2\lambda}{\varepsilon_0}\exp\left[-\lambda R\right], \tag{2}$$

where λ is the reciprocal radius of an impurity state, R is the distance between the impurity centers. With increasing R, the impurity band is continuously narrowed, finally ending in the discrete levels of individual impurity centers ($R>>1/\lambda$). In this case carriers are localized to the dopant sites or confined to the potential wells at impurity sites and the system is converted into an insulator. Therefore, conduction takes place in a narrow impurity band by hopping of carriers from one to another impurity site. When the number of impurity states increases, their overlap increases, thus increasing W_I and the charge transport in sufficiently broadened impurity bands becomes band-like (i.e., metal-like). Determination of the critical carrier concentration at which such a transition from the hopping-like to the metal-like charge transport occurs in cuprates is a very intricate problem, which is at present not completely solved. We believe that the intrinsic large polarons like impurity centers form different superlattices and the widths of the polaronic bands just as the widths of the impurity bands are determined from a relation just like Eq. (1) [18].

III. POSSIBLE MECHANISMS OF METAL–INSULATOR TRANSITIONS AND STRIPE FORMATION IN CUPRATES

In this section we discuss the different mechanisms that cause carrier localization in hole-doped cuprates. The question now arises how, under certain conditions, a system with n carriers in cuprates may undergo a phase transition from a delocalized into a localized state. In inhomogeneous hole-doped cuprates, the strong carrier–carrier interactions, structural disorder, carrier-defect-phonon and carrier-phonon interactions may play an important role in carrier localization and MITs. We first examine the condition for the existence of the localized bipolaronic states in cuprates. At very low doping, the separate levels of extrinsic and intrinsic large bipolarons are formed in the CT gap of the cuprates. As the doping increases towards underdoped region, the binding

energies of such large bipolarons start to decrease gradually and become zero at some doping levels. In particular, the binding energy of the intrinsic large bipolaron is now defined as

$$\Delta_b = E_{bB} - 2\varepsilon_F , \tag{3}$$

where E_{bB} is the binding energy of the large bipolarons, ε_F is the Fermi energy of large polarons.

Actually, large bipolarons can exist in cuprates in carrier-poor domains at $\eta<\eta_c$ and remain localized. At a certain doping level $n=n_c$ or $x= x_c= n_c/n_a$ (where $n_a = 1/V_a$ is the density of the host lattice atoms, V_a is the volume per CuO_2 unit in cuprates), $\Delta_b= 0$ and the large bipolaron will dissociate into two large polarons. Therefore, the critical carrier concentration n_c determined from Eq. (3) is

$$n_c = \frac{(m_p E_{bB})^{3/2}}{3\pi^2\hbar^2} , \tag{4}$$

where m_p is the polaron mass.

For the $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (LSCO) system we can evaluate n_c using the parameter values m_p = 2.1m_e (m_e is the free electron mass), ε_∞ = 3.5–4.5, η = 0.04–0.08, $E_{bB} \approx$ 0.01–0.10 eV. Then we obtain $n_c \simeq (0.0514–1.6238)\times10^{20}$ cm^{-3}. Taking into account that the value of V_a in the orthorhombic LSCO is 190 Å^3, we find the doping levels x_c = 0.001–0.031 at which large bipolarons dissociate into large polarons. This means that such localized 3D bipolarons can exist only in the lightly doped LSCO. At $x>x_c$ the energy bands of extrinsic and intrinsic large polarons may exist, thus permitting charge transport by means of intra-band conduction. In case of narrow polaronic bands, charge transport becomes hopping-like and is caused by intra-band hopping processes [19]. One can assume that if the bandwidth of the extrinsic large polarons exceeds some critical value, their intra-band conduction becomes metal-like. We attempt to find the conditions under which such a insulator-to-metal transition occurs in doped materials.

The conditions for carrier localization or delocalization can be obtained by using the uncertainty principle: $\Delta p\Delta x\geq\hbar/2$, where Δp and Δx are the uncertainties in the momentum and coordinate of a carrier, respectively. This uncertainty relation can be written as

$$\Delta x\Delta E \simeq \frac{\hbar^2(\Delta k)^2}{2m^*}\frac{1}{2\Delta k} , \tag{5}$$

where ΔE and Δk are the uncertainties in the energy and wave vector of the carrier, m^* is the effective mass of a carrier. The expression $\hbar^2(\Delta k)^2/2m^*$ in Eq. (5) represents the uncertainty in the kinetic energy of quasi-free carriers. Taking into account that in the impurity band the uncertainties in the energy of carriers is of order $W_I/2$ and the uncertainty in their wave vector is about $1/a_I$, the relation (5) can be rewritten in the form (cf. [20])

$$\Delta x\Delta E \cong \frac{W_I a_I}{4} . \tag{6}$$

On the other hand, the uncertainty in the energy ΔE of carriers at the hydrogen-like impurity centers is of the order of the repulsive Hubbard energy U, whereas Δx would be of the order of a_H (a_H – Bohr radius). In this case the condition for carrier localization can be written in the form

$$\frac{U}{W_I} > \frac{0.25 a_I}{a_{\rm H}}, \tag{7}$$

which is useful in determining the quantitative criteria for the Mott MITs. From Eq. (7) it follows that the Mott MIT is governed by the ratios U/W_I and $a_I/a_{\rm H}$.

We believe that the strong carrier-defect-phonon and carrier-phonon interactions can initiate MITs in cuprates. If the uncertainty in the energy of large polarons bound to impurities is of order E_{pI} and the uncertainty in the coordinate Δx of these carriers is the order of the radius of the impurity centers R_I, the condition for carrier localization or a new type of MIT can be written as

$$\frac{E_{pI}}{W_I} > \frac{0.25 a_I}{R_I}, \tag{8}$$

from which it follows that the MIT is governed by the ratios E_{pI}/W_I and a_I/R_I.

Similarly, the MIT may be also driven by varying the Fermi energy ε_F and the lattice constant a_p of intrinsic large polarons. The condition for such a MIT can be written as

$$\frac{E_{pI}}{\varepsilon_F} \geq \frac{0.5 a_p}{R_p}. \tag{9}$$

We examine below the possibility of the Mott and other MITs in La-based cuprates.

III.1. The Mott-type metal–insulator transitions

Knowing the Hubbard energy U and the bandwidth W_I one can find the criterion for the Mott MIT from the condition (7). For the case of hydrogen-like impurity centers, the value of U is equal to $55/64\, E_I^{\rm H}$ [21], while the bandwidth W_I is given by [17]

$$W_I \simeq 2z \frac{e^2}{\varepsilon_0 a_{\rm H}} \exp\left[-\lambda R\right]. \tag{10}$$

For $a_I = 4a_{\rm H}$, we obtain from the relation (7) the familiar localization picture described by the Mott criterion $W_I / U \simeq 1$. If we assume $a_I \simeq 3.4783 a_{\rm H}$, we find $W_I \simeq 1.15$, which is known as the Hubbard criterion for the MIT. Then, the Mott MIT point is determined from the condition

$$\frac{W_I}{U} = \frac{64z}{55} \exp\left[-\frac{R}{a_{\rm H}}\right] = \frac{4a_{\rm H}}{a_I}. \tag{11}$$

If the impurity centers form simple cubic, body-centered cubic and face-centered cubic superlattices with $a_I = R$ (for z =6), $a_I = 2R/\sqrt{3}$ (for z =8) and $a_I = \sqrt{2}R$ (for z =12), the appropriate densities of carriers per unit cells of such superlattices are $n = 1/a_I^3$, $n = 2/a_I^3$ and $n = 4/a_I^3$, respectively. It follows that the distance between nearest-neighbor impurity centers are equal to $R = 1/n^{1/3} R$ (for z =6), $R = \sqrt{3}/\left(4n\right)^{1/3}$ (for z =8) and $R = 2^{1/6}/n^{1/3}$ (for z =12). Thus, Eq. (11) can be written as

$$\frac{64z}{55 n^{1/3} a_{\rm H}} \exp\left[-\frac{1}{n^{1/3} a_{\rm H}}\right] = 1 \qquad \text{for } z=6, \tag{12}$$

$$\frac{64\sqrt[3]{2}z}{55 n^{1/3} a_{\rm H}} \exp\left[-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt[3]{4} n^{1/3} a_{\rm H}}\right] = 1 \qquad \text{for } z=8, \tag{13}$$

$$\frac{64\sqrt[3]{4}z}{55n^{1/3}a_{\rm H}}\exp\left[-\frac{2^{1/6}}{n^{1/3}a_{\rm H}}\right]=1 \qquad \text{for } z=12, \tag{14}$$

from which we obtain the following criteria for the Mott MITs: $n_c^{1/3}a_{\rm H}\simeq 0.3265$ (for z=6), $n_c^{1/3}a_{\rm H}\simeq 0.2968$ (for z=8), $n_c^{1/3}a_{\rm H}\simeq 0.2504$ (for z=12).

If we take $m^*=m_e$ and ε_0=30, we find $a_{\rm H}$=15.87 Å in LSCO, so that the Mott MITs would occur at the hole concentrations $x_c=n_c/n_a\simeq 0.00075$–$0.00166$. These values of x_c are much smaller than the value of $x_c\simeq 0.02$ at which the destruction of the antiferromagnetic (AF) order is observed in LSCO [1]. However, the large-radius dopant and large polaron may form the hydrogenic impurity center in LSCO. The hydrogenic state of a large polaron in LSCO has an effective Bohr radius $a_{\rm H}=0.529\varepsilon_0(m_e/m_p)$ Å. If we take take $m_p=2.1m_e$ and ε_0=28, we find $a_{\rm H}\simeq 7.06$ Å. In this case the Mott transitions would occur at x_c=0.0141 (for z=8) and $x_c\simeq 0.0188$ (for z=6). These values of x_c are close to the experimental values $x\simeq 0.018-0.02$ at which the AF order is destroyed in LSCO [1, 22].

III.2.The other metal–insulator transitions and stripe formation

From the relation (8) we obtain the following criteria for the new MITs:

$$\frac{0.5z}{n^{1/3}R_I}\exp\left[-\frac{1}{n^{1/3}R_I}\right]=1 \qquad \text{for } z=6, \tag{15}$$

$$\frac{0.5\sqrt[3]{2}z}{n^{1/3}R_I}\exp\left[-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt[3]{4}n^{1/3}R_I}\right]=1 \qquad \text{for } z=8, \tag{16}$$

$$\frac{0.5\sqrt[3]{4}z}{n^{1/3}R_I}\exp\left[-\frac{2^{1/6}}{n^{1/3}R_I}\right]=1 \qquad \text{for } z=12, \tag{17}$$

from which it follows that $n^{1/3}R_I\simeq 0.651$ (for z=6), $n^{1/3}R_I\simeq 0.453$ (for z=8), $n^{1/3}R_I\simeq 0.3354$ (for z=12).

We are now able to evaluate n_c in La-based cuprates using the above values of $n^{1/3}R_I$. For ε_∞=4.5, and η=0.04–0.12 the value of R_I is found to vary between 8.44 and 9.91 Å. In these cases, the MITs occur at $x_c\simeq 0.0539$–0.0872 (for z=6) and x_c=0.0182–0.0294 (for z=8) in La-based cuprates with small-radius dopants. When ε_∞=3.5, η=0.04–0.12 and $R_I\simeq 6.41$–7.56, the MITs occur in these systems at $x_c\simeq 0.1213$–0.1990 (for z=6) and $x_c\simeq 0.0409$–0.0671 (for z=8). For ε_∞<3.5 and z=6, the metal-insulator boundary of La-based cuprates containing small-radius dopants lies in the deeply overdoped region (x_c>0.2). Further, the double substitution of smaller cations for host lattice ions and dopants may also favor the MITs and stripe formation occurring in a wide range of doping of La-based cuprates. In $La_{2-x-y}Nd_ySr_xCuO_4$ and $La_{2-x-y}Eu_ySr_xCuO_4$ with small-radius dopants Nd^{3+} and Eu^{3+}, the static stripe phases are observed in a wide range of carrier concentration [23].

IV. CONCLUSION

We argued that the inhomogeneous spatial distribution of dopants and hole carriers favor the specific charge ordering in the form of a 3D network of carrier-rich and carrier-poor stripes and the formation of different superlattices and in-gap bands of dopants and large polarons.We have shown that the localized in-gap states develop into metallic states at some critical doping level. We have succeeded in deriving the quantitative criteria for the MITs caused by strong carrier–carrier (i.e. Coulomb) interaction on the same impurity center, disorder, carrier-dopant-phonon and carrier-phonon interactions. The applicability limits of the Mott and other MITs in hole-doped cuprates are determined. Our results show that the other MITs in the cuprates are accompanied by the formation of static (insulating) stripes in carrier-poor domains and dynamic (metallic) ones in carrier rich domains.

Acknowledgments. We thank E.M. Ibragimova, P.J. Baimatov, E.X. Karimbaev and Z.S. Khudayberdiev for useful discussions. This work was supported by the Foundation of Uzbek Academy of Sciences, grant No. OT-Φ2-15.

REFERENCES

1. M.A. Kastner, R.J. Birgeneau, G. Shirane, and Y. Endoh, Rev. Mod. Phys. **70**, 897 (1998).
2. Ch. Renner, B. Revaz, J.-Y. Genoud, K. Kadowaki, O. Fischer, Phys. Rev. Lett. **80**, 149 (1998).
3. N. Ichikawa, S. Uchida, J.M. Tranquada, T. Niemőller, P.M. Gehring, S.-H. Lee, J.R. Schneider, Phys. Rev. Lett. **85**, 1736 (2000).
4. S. Ono, Y. Ando, T. Murayama, F.F. Balakirev, J.B. Betts, G.S. Boebinger, Physica C **357-360**, 138 (2001).
5. Y. Ando, S. Ono, X.F. Sun, J. Takeya, F.F. Balakirev, J.B. Betts, G.S. Boebinger, Phys. Rev. Lett. **92**, 247004 (2004).
6. G.S. Boebinger, Y. Ando, A. Passner, T. Kimura, M. Okuya, J. Shimoyama, K. Kishio, K. Tamasaku, N. Ichikawa, S. Uchida, Phys. Rev. Lett. **77**, 5417 (1996).
7. J.M. Tranquada, B.J. Sternlieb, J.D. Aye, Y. Nakamura, S. Uchida, Nature **375**, 561 (1995).
8. J. Zaanen, O.Y. Osman, W. van Saarloos, Phys. Rev. B **58**, R11868 (1998).
9. R.S. Markiewicz, C. Kusko. Phys. Rev. B **65**, 064520 (2002).
10. T. Kato, T. Noguchi, R. Saito, T. Machida, H. Sakata, Physica C **460-462**, 880 (2007).
11. M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1039 (1998).
12. P.A. Lee, N. Nagoasa, X.-G. Wen, Rev. Mod. Phys. **78**, 17 (2006).
13. J. Zaanen, cond-mat/0103255.
14. S. Dzhumanov, Int. J. Mod. Phys. B **12**, 2151 (1998).
15. S. Chakravarty, R.B. Laughlin, D.K. Morr, C. Nayak, Phys. Rev. B **63**, 094503 (2001).
16. J. Zaanen, G.A. Sawatzky, J.W. Allen, Phys. Rev. Lett. **55**, 418 (1985).
17. N.F. Mott, E.A. Devis, Electronic Processes in Non-Crystalline Materials (Mir, Moscow, 1974.
18. J. Appel. In: Polarons, Ya.A. Firsov (Ed.) (Nauka, Moscow, 1975, p. 11).
19. F. Walz, J. Phys.: Condens. Matter **14**, R285 (2002).
20. B.K. Ridley, Quantum Processes in Semiconductors (Mir, Moscow, 1986).
21. S. Dzhumanov, U.T. Kurbanov, A. Kurmantayev, Int. J. Mod. Phys. B **21**, 169 (2007).
22. K. Ishida, H. Aya, Y. Tokunaga, H. Kotegawa, Y. Kitaoka, M. Fujita, K. Yamada, Phys. Rev. Lett. **92**, 257001 (2004).
23. M. Hücker, G.D. Gu, J.M. Tranquada, M.V. Zimmermann, H.-H. Klauss, N.J. Curro, M. Braden, B. Büchner, Physica C **460-462**, 170 (2007).

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.280-282

НЕВАЛЕНТНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ НИЗШИХ ФУЛЛЕРЕНОВ С ГРАФЕНОМ

В.Г. Стельмах[1], И.Д. Ядгаров[1], А.Н. Улукмурадов[2], У.Б. Улжаев[2]

[1]Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, ishmuminyadgarov@gmail.com
[2]Ташкентский институт текстильной и легкой промышленности, Ташкент, Узбекистан
(Получена 18.04.2019)

Компьютер модели асосида нуқсонсиз графен билан паст фуллеренларнинг C_n (n=20, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 50, 60) ўзаро таъсири тадқиқ этилди. Фуллеренлардаги атомлар сонининг адсорбция энергиясига боғланиши тахлил қилинди ва фуллеренларнинг турғун оралиқдаги адсорбция энергиялари олинди.

Методами компьютерного моделирования исследовано невалентное взаимодействие фуллеренов C_n (n=20, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 50, 60) с бездефектным графеном. Были получены энергии адсорбции, равновесные расстояния фуллеренов и проанализированы зависимости этих величин от количества атомов в этих фуллеренах.

The nonvalent interaction of fullerenes C_n (n = 20, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 50, 60) with defect-free graphene has been studied using computer simulation methods. The adsorption energies and equilibrium distances of these fullerenes were obtained and the dependences of these quantities on the number of atoms in these fullerenes were analyzed.

В общем виде молекула фуллерена, состоящая из атомов углерода, имеет формулу C_{20+2m}, где $20+2m$ – число атомов углерода в молекуле фуллерена, m – натуральное число. В отличие от других кластеров углерода, грани фуллеренов, имеющие форму шести- или пятиугольников, образуют замкнутую объемную поверхность, близкую к шароподобной или эллипсоидальной. В наименьшем фуллерене C_{20} связи C–C образуют только правильные пятиугольники, в других фуллеренах присутствуют также шестиугольники, например, в самом распространенном фуллерене C_{60} связи C–C образуют 20 шестиугольников и 12 пятиугольников. Каждый атом углерода в молекуле фуллерена окружен тремя соседями, с двумя из которых он связан простой ковалентной связью, а с третьим двойной.

Бездефектный графен является плоской углеродной структурой [1], состоящей только из шестиугольников, похожих на шестиугольники фуллерена. С графеном могут взаимодействовать углеродные атомы, димеры и тримеры [2-4], молекулы CH_4 и CO_2 [5] и др. В работе [6] компьютерным моделированием *ab-initio* методом были рассмотрены разные случаи взаимодействия фуллерена C_{60} с поверхностью графена, в том числе имеющего вакансии и другие дефекты.

В настоящей работе посредством компьютерного моделирования в рамках классической молекулярной динамики рассматривается невалентное взаимодействие с бездефектным графеном фуллеренов C_n (n=20, 24, 26, 28, 30, 32, 36, 50, 60), которые в дальнейшем мы условно называем низшими фуллеренами.

Сначала методом минимизации энергии с использованием потенциала Бреннера второго поколения (REBO), который хорошо описывает углеродные

структуры [7], были построены компьютерные модели одиночных бездефектных низших фуллеренов. Затем строилась компьютерная модель одиночного бездефектного графена. Для этого был использован прямоугольный участок графена, состоящий из 112 атомов углерода, применялся тот же метод минимизации энергии с потенциалом Бреннера и с наложением периодических условий на граничные атомы; подробности и обоснование такой модели графена можно найти в работе [8].

Затем методом «заморозки» смоделировали невалентное взаимодействие фуллеренов с графеном, для этого было добавлено взаимодействие Леннарда-Джонсона между атомами фуллерена C_n и атомами графена, согласно потенциалу взаимодействия

$$V(r) = D[(r_0 / r)^{12} - 2(r_0 / r)^6], \quad (1)$$

где параметры D = 0.003202 эВ, r_0 = 3.985 Å использованы в аналитических расчетах в [10], r – расстояние между одним из атомов фуллерена и одним из атомов графена. Анализ результатов моделирования позволил определить зависимости энергии адсорбции E_{ads} и равновесного расстояния R_0 низших фуллеренов от количества атомов в фуллерене (см. рис. 1 и 2).

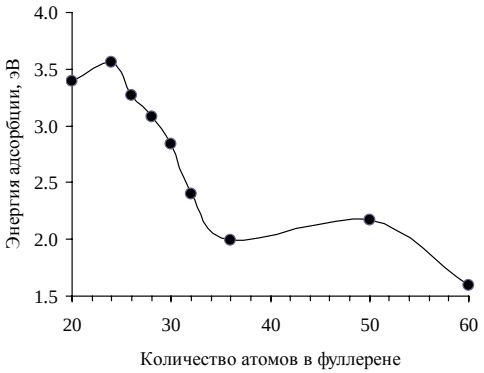


Рис. 1. Зависимость энергии адсорбции фуллерена на графен от количества атомов в фуллерене.

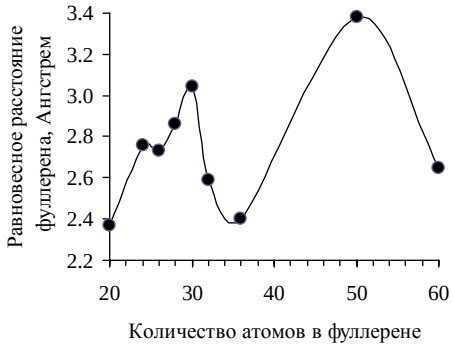


Рис. 2. Зависимость равновесного расстояния фуллерена от количества атомов в фуллерене.

Зависимости, показанные на рис. 1 и 2, можно аппроксимировать линейными функциями $y(n)=an+b$ при малых n, величины a и b приведены в табл. 1.

Таблица 1. Величины a и b при линейной аппроксимации $y(n)=an+b$ зависимостей E_{ads} и R_0 от количества атомов n в фуллерене.

Аппроксимируемая физическая величина	a	b	n	Достоверность аппроксимации
E_{ads}, эВ	–0.13, эВ	6.75, эВ	24, 36	0.988
R_0, Å	0.06, Å	1.17, Å	20, 30	0.930

Отметим, что равновесное расстояние R_0, определяемое как расстояние, отсчитываемое от нижней точки на каркасе фуллерена до плоскости графена, меньше расстояния $R_{\min}$ – наименьшего расстояния между атомами фуллерена и

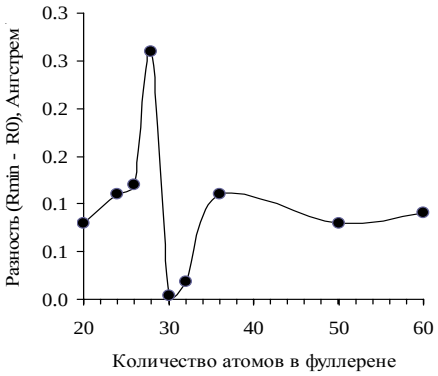


Рис. 3. Зависимость разности (R_{min}–R_0) от количества атомов в фуллерене.

графена. Зависимость разности (R_{min}–R_0) от количества атомов n в фуллерене показана на рис. 3. Сложный характер этой зависимости обусловлен тем, что форма низшего фуллерена отклоняется от сферической нерегулярным образом при разном количестве атомов в фуллерене. Так как из низших фуллеренов фуллерен C_{60} является наиболее стабильным, массовым в получении и первым из всех фуллеренов, обнаруженных экспериментально, то в заключение мы приведем в табл. 2 полученные нами и другими авторами значения энергий адсорбции и равновесных расстояний для случая невалентного взаимодействия фуллерена C_{60} с бездефектным графеном.

Таблица 2. Параметры взаимодействия фуллерена C_{60} с графеном.

Энергия адсорбции, эВ	Равновесное расстояние, Å	Работа
0.738	3.25	[11]
0.796	2.85	[12]
1.007–1.019	2.7–3.6	[13]
0.09–3.19	1.55–4.11	[6]
0.957	3.05	[10]
1.597	2.65	Наст. работа

Работа выполнена в рамках гранта ОТ-Ф2-46 фундаментальных исследований АН РУз.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.K. Geim, K.S. Novoselov, Nature Mater. **6**, 183 (2007).
2. O. Lehtinen, N. Vats, G. Algara-Siller, P. Knyrim, U. Kaiser, Nano Lett. **15** (1), 235 (2015).
3. А.А. Джурахалов, В.Г. Стельмах, Н.Ю. Тураев, И.Д. Ядгаров, Узбек. физич. журн. **17**, №6, 400 (2015).
4. А.А. Джурахалов, Н.Ю. Тураев, В.Г. Стельмах, И.Д. Ядгаров, ДАН РУз №2, 13 (2016).
5. B.C. Wood, Sh.Y. Bhide, D. Dutta, V.S. Kandaga, A.D. Pathak, J. of Chemical Physics **137**, 054702 (2012).
6. S. Laref, A.M. Asaduzzaman, W. Beck, P.A. Deymier, K. Runge, L. Adamowicz, K. Muralidharan, Chemical Physics Letters **582**, 115 (2013).
7. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnot, J. Phys: Condens. Matter. **14**, 783 (2002).
8. A.A. Dzhurakhalov, F.M. Peeters, Carbon **49**, 3258 (2011).
9. H. Ulbricht, G. Moos, T. Hertel, Phys. Rev. Lett. **90**, 095501 (2003).
10. S.S. Rechviashvili, M.M. Bukhurova, Prot. Met. Phys. Chem. Surf. **53** (6), 967 (2017).
11. L.A. Girifalco, M. Hodak, R.S. Lee. Phys. Rev. B **62**, 13104 (2000).
12. Y.J. Dappe, J. Ortega, F. Flores. Phys. Rev. B **79**, 165409 (2009).
13. M. Svec, P. Merino, Y.J. Dappe, C. González, E. Abad, P. Jelínek, J.A. Martín-Gago, Phys. Rev. B **86**, 121407 (2012).

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.283-292

СТРУКТУРЫ КЛАСТЕРОВ $Si_nO_m^+$, РАСПЫЛЕННЫХ ИОННОЙ БОМБАРДИРОВКОЙ

С.Е. Максимов[1,2], Х.Б. Ашуров[1], М.М. Адилов[1], С.Ф. Коваленко[1], О.Ф. Тукфатуллин[1], Ш.Т. Хожиев[1]

[1]Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им.У.А.Арифова АН РУз, Ташкент, Узбекистан, maksimov_s@yahoo.com

[2]Институт химии и физики полимеров АН РУз, Ташкент, Узбекистан

(Получена 10.05.2019)

$Si_nO_m^+$ кластерлар тескари геометрияли, иккиламчи фокусировкали ионли микроанализатор ёрдамида Si сиртидан Xe^+ билан бомбардимон қилиш ва камерага кислородни ҳайдаш йули билан ўрганилган. Кластерли катионлар учун тузилиш схемаси таклиф этилган, ҳамда унинг ва нейтраллар ва анион кластерлар учун олинган натижалар билан мутаносиблиги аниқланган.

С использованием ионного микроанализатора с двойной фокусировкой обратной геометрии исследованы кластеры $Si_nO_m^+$, распыленные с поверхности Si ионами Xe^+ при напуске кислорода на поверхность. Представлены предполагаемые структурные схемы кластерных катионов, проведено сравнение со структурами нейтралей и анионных кластеров оксида кремния.

$Si_nO_m^+$ cluster ions sputtered from Si surface by Xe^+ under O_2 flooding have been investigated using double focusing ion microanalyzer with reverse geometry. Proposed structural schemes of the cluster cations have been presented, the comparison has been made with the structures of neutrals and anion clusters of silicon oxide.

I. ВВЕДЕНИЕ

Оксид кремния играет важную роль в полупроводниковой технологии, катализе, химии поверхности. Физические свойства слоёв и структур SiO_2 сильно зависят от их размеров. Так, в микронной области значительный интерес представляют т.н. частицы Штёбера [1] – монодисперсные сферические частицы диоксида кремния с размерами, охватывающими практически весь коллоидный спектр. Эти частицы находят всё большее применение в различных областях техники, в том числе в информационных и коммуникационных технологиях, в медицине и биологии, в мониторинге окружающей среды [2-4], а также в лазерных технологиях [5-7]. Сферические частицы SiO_2 с плотно упакованной структурой (фотонные кристаллы) используются в качестве пассивных оптических устройств, таких как фильтры, зеркала, переключатели и суперпризмы [8].

Среди структур оксида кремния особое место занимает гранулированный кремний, который представляет собой зёрна кремния с различным линейным размером и естественным окисным слоем SiO_2 на их поверхности. Особый интерес обусловлен описанным в [9, 10] тепловольтаическим эффектом, заключающимся в генерации ЭДС в изотипном, однородно нагретом преобразователе тепловой энергии (ПТЭ) из микрозернистого кремния. При этом величина данной ЭДС в десятки раз превышала таковую, которая могла бы возникнуть, если допустить наличие в теле ПТЭ неконтролируемого в эксперименте градиента температуры. В

работах [11-15] описаны проявления этого эффекта; показано, что он может быть объяснён процессами переноса носителей через наномасштабные оксидные межзёренные слои.

Известно, что когда количество частиц вещества уменьшается до нескольких сотен атомов и менее, его свойства радикально изменяются по сравнению с объёмными материалами [16], поэтому в последние годы поискам методов генерации и исследованиям фундаментальных свойств наночастиц и кластеров оксида кремния уделяется значительное внимание. Вторично-ионная масс-спектрометрия (ВИМС) имеет ряд преимуществ перед другими методами получения кластеров и исследования их свойств, поскольку, во-первых, позволяет путём подбора распыляемого материала и сорта бомбардирующих ионов генерировать не только гомо-, но и гетероядерные кластеры, которые трудно или вообще невозможно синтезировать другими методами. Во-вторых, высокая доля заряженных и возбуждённых кластеров обеспечивает значительное удобство для проведения исследований.

Целью настоящей работы является использование возможностей метода ВИМС для генерации и изучения положительно заряженных кластеров оксида кремния с различным числом атомов кремния и кислорода и оценка возможных структур таких кластеров на основе сравнения полученных результатов с литературными данными.

II. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ ПРИБОР И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

Исследования эмиссии и фрагментации распыленных кластеров $Si_nO_m^+$ проводили на вторично-ионном масс-спектрометре с двойной фокусировкой обратной геометрии [17] (рис. 1) по методике [18-21]. Кластеры генерировали бомбардировкой мишеней Si ионами Xe^+ с энергией 8.5 кэВ под углом 45° при напуске O_2 в рабочую камеру до давления 5×10^{-3} Па и сканировании поверхности в растр 1.5×1.5 мм. Ионные токи составляли 0.4–0.5 мкА при плотности тока ~10^{-4} А·см$^{-2}$. Ускоренные до энергии eU_0 = 5000 эВ вторичные ионы поступали на вход масс-спектрометра в режиме динамического согласования [17]. Давление в бесполевых зонах движения вторичных ионов составляло ~10^{-6} Па. В качестве объектов исследования были выбраны положительные кластеры $Si_nO_m^+$, поскольку согласно [18] в спектре масс-отрицательных кластеров оксида кремния преобладают в основном структуры вида $Si_nO^-_{2n}$ и $Si_nO^-_{2+1}$, тогда как распыленные положительные ионы имеют различное число атомов кремния и кислорода в своём составе [19-21].

В приборе (рис. 1) имеются две бесполевые зоны, в которых возможна прямая регистрация распадов вторичных ионов, протекающих в различных временных диапазонах после эмиссии: зона S_1 – пространство между краем иммерсионного обьектива и торцом магнитного анализатора (время пролета зоны ~10^{-6}–10^{-5} с), и зона S_2 между выходной границей поля масс-анализатора и входной границей поля энергоанализатора (время пролета зоны ~10^{-5}–10^{-4} с). Если реакция распада распыленного кластера

$$M_n^{\pm} \rightarrow M_{n-k}^{\pm} + M_k, \qquad (1)$$

где $M_n^{\pm}$ – масса материнского иона и $M_{n-k}^{\pm}$ – масса заряженного осколка, то кинетическая энергия образующегося во второй бесполевой зоне S_2 осколка равна

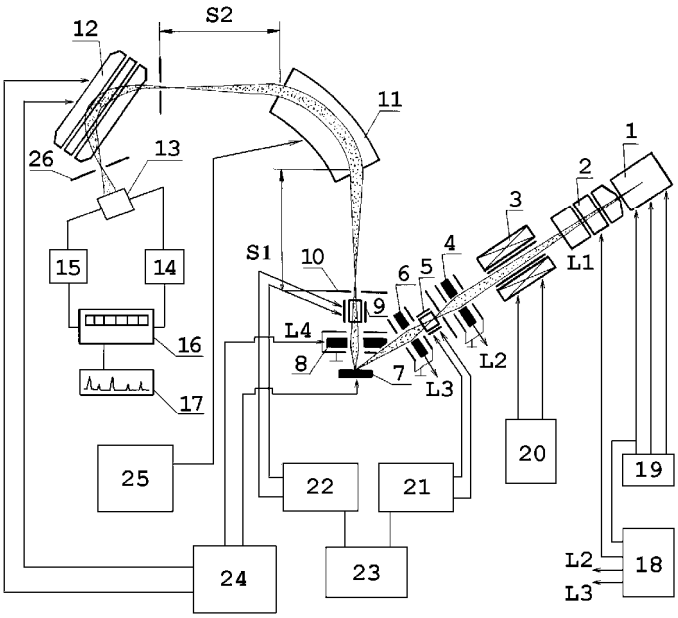


Рис. 1. Масс-спектрометр с двойной фокусировкой обратной геометрии [17]: 1 – ионный источник; 2, 4, 6 – линзы фокусировки первичного пучка; 3 – фильтр Вина; 5 – система сканирования первичного пучка; 7 – образец; 8 – линза фокусировки вторичного пучка; 9 – система отклонения вторичного пучка; 10, 26 – диафрагмы; 11 – магнитный анализатор; 12 – энергоанализатор; 13 – переключатель УПТ-ВЭУ; 14-17 – система регистрации; 18-25 – блоки управления; S_1 и S_2 – бесполевые зоны масс-анализатора.

$$E_{fr} = \left(M_{n-k}^{\pm} / M_n^{\pm} \right) eU_0 , \qquad (2)$$

где U_0 – напряжение ускорения, приложенное к образцу. Осколочные ионы, образовавшиеся в результате реакции (1) в первой бесполевой зоне S_1, можно зарегистрировать настройкой масс-анализатора на пропускание ионов с кажущейся массой $M^* = \left(M_{n-k}^{\pm} \right)^2 / M_n^{\pm}$ при одновременной настройке энергоанализатора на полосу пропускания осколочных ионов с энергией E_{fr}, определяемой соотношением (2). Абсолютное разрешение прибора по энергии изменяли регулировкой ширины промежуточной и выходной щелей масс-спектрометра, так что во всех исследованиях для осколочных ионов оно соответствовало величине 2±0.5 эВ.

III. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Исследование распыленных $Si_nO_m^+$ кластеров показывает, что их масс-спектр в описанных выше экспериментальных условиях соответствует в основном представленному ранее в [19, 21]. На рис. 2 приведена соответствующая диаграмма [19] распределения интенсивностей выходов положительно заряженных кластеров $Si_nO_m^+$, распыленных ионами Xe^+ при напуске кислорода. Диаграмма сгруппирована в соответствии с числом атомов кремния n (n – номер кластерной серии, m – число атомов O в кластере). Полученные результаты свидетельствуют, что в этом случае наблюдается интенсивная эмиссия $Si_nO_m^+$ кластеров с различным

числом атомов кремния и кислорода в своём составе. В целом, для $Si_nO_m^+$ характерно уменьшение интенсивностей выходов с увеличением чисел *n* и *m*, и для положительных ионов, в отличие от отрицательных [18], практически отсутствуют какие-либо кластеры, явно выделенные по своей относительной интенсивности.

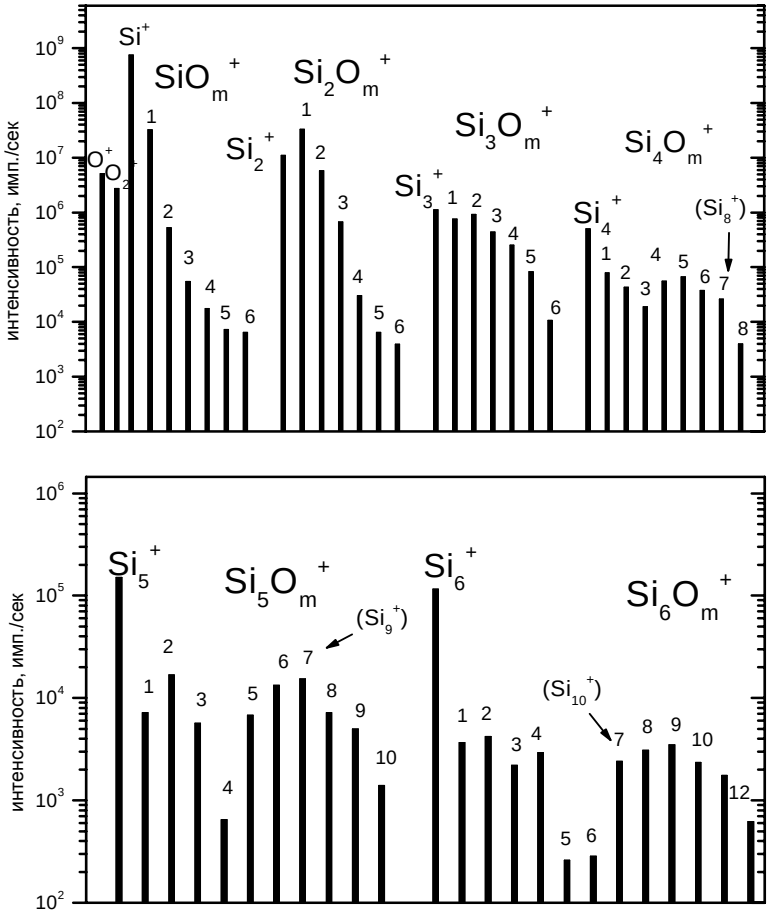


Рис. 2. Диаграммы выходов положительных кластерных ионов $Si_nO_m^+$, полученных при распылении поверхности кремния ионами Xe^+ с энергией 8.5 кэВ при напуске кислорода [19].

Выводы о возможной структуре распыленных кластеров могут быть сделаны на основе изучения их каналов распада и определения их энергий диссоциации. Фрагментационные каналы $Si_nO_m^+$ с n=1–3 были исследованы нами ранее в [19]. В табл. 1 представлены основные (по три наиболее интенсивных) распады кластеров $Si_nO_m^+$ с n=4–5. Как и для $Si_nO_m^+$ с числом n=1–3, для большинства этих кластеров (кроме $Si_5O_5^+$) преобладающим является канал с выбросом нейтрального SiO, но в целом у катионов оксида кремния отсутствуют какие-либо явно выделяющиеся направления распадов. Сравнивая полученные результаты с данными работы [22], в которой структуры и направления фрагментации нейтральных кластеров Si_nO_m изучали компьютерным моделированием с использованием метода теории функционала плотности (density functional theory, DFT), необходимо отметить, что

все каналы фрагментации нейтралей, найденные в [22], наблюдаются нами экспериментально у положительных $Si_nO_m^+$, имеющих то же самое число атомов кремния и кислорода в своём составе. В целом, однако, и полученные в [19], и представленные в табл. 1 результаты исследований направлений и вероятностей распадов положительных ионов $Si_nO_m^+$ указывают на наличие большего количества каналов фрагментации по сравнению с распадами нейтральных Si_nO_m [22] той же стехиометрии. В то же время значительное подобие каналов фрагментации положительно заряженных $Si_nO_m^+$, представленных в [19] и в табл. 1, и направлений распадов нейтралей Si_nO_m, имеющих то же самое число атомов кремния и кислорода в своём составе, позволяет высказать предположение о подобии их структур.

Таблица 1. Основные каналы распада и вероятности P(%) фрагментации кластеров $Si_nO_m^+$ с n=4**,** 5, распыленных с поверхности Si ионами Xe^+ при напуске O_2.

Ион	Канал распада	Заряженный фрагмент	Нейтральный фрагмент	Зона S_2, P (%)	Зона S_1, P (%)
Si_4O^+	$Si_3^+ + SiO$	Si_3^+	SiO	7.7×10^{-2}	6.2×10^{-1}
	$Si_2O^+ + Si_2$	Si_2O^+	Si_2	1.4×10^{-2}	6.1×10^{-2}
	$Si_3O^+ + Si$	Si_3O^+	Si	3.4×10^{-1}	1.5
$Si_4O_2^+$	$Si_2O^+ + Si_2O$	Si_2O^+	Si_2O	1.6×10^{-2}	1.1×10^{-1}
	$Si_3O^+ + SiO$	Si_3O^+	SiO	3.7×10^{-1}	2.8
	$Si_3O_2^+ + Si$	$Si_3O_2^+$	Si	5.5×10^{-2}	9.2×10^{-2}
$Si_4O_3^+$	$Si_2O^+ + Si_2O_2$	Si_2O^+	Si_2O_2	3.5×10^{-2}	2.0×10^{-1}
	$Si_3O_2^+ + SiO$	$Si_3O_2^+$	SiO	7.0×10^{-1}	5.3
	$Si_3O_3^+ + Si$	$Si_3O_3^+$	Si	1.4×10^{-2}	4.0×10^{-2}
$Si_4O_4^+$	$Si_3O_3^+ + SiO$	$Si_3O_3^+$	SiO	6.8×10^{-1}	4.4
	$Si_2O_2^+ + Si_2O_2$	$Si_2O_2^+$	Si_2O_2	2.2×10^{-3}	2.1×10^{-2}
	$SiO^+ + Si_3O_3$	SiO^+	Si_3O_3	1.7×10^{-3}	1.1×10^{-2}
$Si_4O_5^+$	$Si_3O_3^+ + SiO_2$	$Si_3O_3^+$	SiO_2	3.5×10^{-3}	2.1×10^{-2}
	$Si_3O_4^+ + SiO$	$Si_3O_4^+$	SiO	5.6×10^{-1}	4.0
	$Si_4O_3^+ + O_2$	$Si_4O_3^+$	O_2	1.2×10^{-1}	1.6×10^{-3}
$Si_4O_6^+$	$Si_3O_4^+ + SiO_2$	$Si_3O_4^+$	SiO_2	3.6×10^{-2}	2.5×10^{-1}
	$Si_3O_5^+ + SiO$	$Si_3O_5^+$	SiO	6.1×10^{-1}	3.5
	$Si_4O_5^+ + O$	$Si_4O_5^+$	O	2.1×10^{-2}	1.7×10^{-1}
Si_5O^+	$Si_4^+ + SiO$	Si_4^+	SiO	1.7×10^{-1}	2.1
	$Si_2O^+ + Si_3$	Si_2O^+	Si_3	2.1×10^{-2}	1.3×10^{-1}
	$Si_4O^+ + Si$	Si_4O^+	Si	1.3×10^{-1}	2.2×10^{-2}
$Si_5O_2^+$	$Si_3O^+ + Si_2O$	Si_3O^+	Si_2O	1.8×10^{-2}	9.0×10^{-2}
	$Si_4O^+ + SiO$	Si_4O^+	SiO	4.2×10^{-1}	2.4
	$Si_4O_2^+ + Si$	$Si_4O_2^+$	Si	1.1×10^{-2}	2.1×10^{-2}
$Si_5O_3^+$	$Si_3O_2^+ + Si_2O$	$Si_3O_2^+$	Si_2O	8.2×10^{-2}	2.2
	$Si_4O_2^+ + SiO$	$Si_4O_2^+$	SiO	5.6×10^{-1}	2.4
	$Si_4O_3^+ + Si$	$Si_4O_3^+$	Si	1.1	5.6
$Si_5O_5^+$	$Si_3O_3^+ + Si_2O_2$	$Si_3O_3^+$	Si_2O_2	2.4×10^{-2}	1.2×10^{-1}
	$Si_4O^+ + SiO_4$	Si_4O^+	SiO_4	3.9×10^{-2}	5.3×10^{-2}
	$Si_4O_5^+ + Si$	$Si_4O_5^+$	Si	4.7×10^{-2}	4.7×10^{-2}
$Si_5O_6^+$	$Si_4O_5^+ + SiO$	$Si_4O_5^+$	SiO	9.9×10^{-1}	6.4
	$Si_5O_3^+ + O_3$	$Si_5O_3^+$	O_3	4.0×10^{-2}	4.0×10^{-2}
	$Si_5O_4^+ + O_2$	$Si_5O_4^+$	O_2	6.9×10^{-1}	3.1×10^{-3}

Для определения возможных структур распыленных кластерных ионов чрезвычайно важно знать численные значения их энергии активации распада (диссоциации). В работе [20] нами были получены энергии диссоциации ряда кластеров $Si_nO_m^+$ (n=2–5, m=2–7) по методике, основанной на измерении спектров кинетических энергий осколочных ионов при фрагментации кластеров во второй бесполевой зоне S_2 прибора (рис. 1). Для расчёта на основе этих измерений энергий диссоциации $Si_nO_m^+$ в [20] была использована методика на базе теории мономолекулярных реакций Райса-Рамспергера-Касселя (РРК) [23], а также описанная, в частности в [24], методика с использованием модели «испарительного ансамбля» [25, 26]. Полученные в [20] результаты приведены в табл. 2. К сожалению, относительно малые интенсивности сигналов фрагментных ионов при распадах кластеров $Si_nO_m^+$ больших размеров не позволяют провести для них аналогичные измерения спектров кинетических энергий осколочных ионов. Данные табл. 2 свидетельствуют, однако, о том, что энергии диссоциации положительных кластеров $Si_nO_m^+$ близки к энергиям связи на отрыв по соответствующим фрагментационным каналам нейтральных кластеров Si_nO_m [22]. С учётом найденных значений энергий диссоциации и значительного подобия каналов фрагментации положительных кластеров $Si_nO_m^+$ и нейтралей Si_nO_m можно сделать вывод о близости структуры и свойств положительных $Si_nO_m^+$ и нейтральных кластеров Si_nO_m одинакового состава. Следует отметить также, что аналогичный вывод о качественном подобии структур катионов и нейтральных кластеров оксида кремния одинакового состава был сделан авторами [27] при изучении кластерных ионов $Si_nO_m^+$, полученных методом лазерной абляции, и расчёте структур и характеристик $Si_nO_m^+$ и Si_nO_m методом DFT.

Таблица 2. Энергии диссоциации (E_d) положительных кластеров $Si_nO_m^+$ [20] и нейтральных (E_b) кластеров Si_nO_m [22]: KL – модель “испарительного ансамбля”; RRK – теория мономолекулярных реакций.

Катион	Канал распада	E_d, эВ		Нейтр. класт.	Канал распада	E_b, эВ [22]
		(KL)	(RRK)			
$Si_2O_3^+$	$Si_2O_3^+ \rightarrow SiO^+ + SiO_2$	2.26	3.20	Si_2O_3	$Si_2O_3 \rightarrow SiO + SiO_2$	3.34
$Si_3O_2^+$	$Si_3O_2^+ \rightarrow Si_2O^+ + SiO$	0.75	1.06	Si_3O_2	$Si_3O_2 \rightarrow Si_2O + SiO$	1.68
$Si_3O_3^+$	$Si_3O_3^+ \rightarrow Si_2O_2^+ + SiO$	1.21	1.30	Si_3O_3	$Si_3O_3 \rightarrow Si_2O_2 + SiO$	2.38
$Si_3O_4^+$	$Si_3O_4^+ \rightarrow Si_2O_2^+ + SiO_2$	3.19	3.09	Si_3O_4	$Si_3O_4 \rightarrow Si_2O_3 + SiO$	3.43
$Si_4O_3^+$	$Si_4O_3^+ \rightarrow Si_3O_2^+ + SiO$	1.14	1.10	Si_4O_3	$Si_4O_3 \rightarrow Si_3O_2 + SiO$	2.11
$Si_4O_4^+$	$Si_4O_4^+ \rightarrow Si_3O_3^+ + SiO$	1.82	1.65	Si_4O_4	$Si_4O_4 \rightarrow Si_3O_3 + SiO$	1.61
$Si_4O_5^+$	$Si_4O_5^+ \rightarrow Si_3O_4^+ + SiO$	2.91	2.54	Si_4O_5	$Si_4O_5 \rightarrow Si_3O_4 + SiO$	2.51
$Si_4O_6^+$	$Si_4O_6^+ \rightarrow Si_3O_5^+ + SiO$	3.72	3.18	Si_4O_6	$Si_4O_6 \rightarrow Si_3O_5 + SiO$	3.49
$Si_5O_2^+$	$Si_5O_2^+ \rightarrow Si_4O^+ + SiO$	3.0	2.89	Si_5O_2	$Si_5O_2 \rightarrow Si_4O + SiO$	2.87
$Si_5O_6^+$	$Si_5O_6^+ \rightarrow Si_4O_5^+ + SiO$	2.95	2.49	Si_5O_6	$Si_5O_6 \rightarrow Si_4O_5 + SiO$	2.48
$Si_5O_7^+$	$Si_5O_7^+ \rightarrow Si_4O_6^+ + SiO$	3.70	3.09	Si_5O_7	$Si_5O_7 \rightarrow Si_4O_6 + SiO$	2.80

Совокупность полученных результатов позволяет высказать предположения о возможной структуре кластерных ионов $Si_nO_m^+$: наиболее вероятными для них являются структуры (рис. 3), аналогичные рассчитанным в [22] нейтральным Si_nO_m в основном состоянии. Отдельным вопросом в этом случае является локализация положительного заряда. Согласно [27], избыток положительного заряда, созданный

удалением одного электрона, распределяется между атомами Si и вызывает напряжение кластерной структуры; энергия катиона при этом стабилизируется изменением длины Si-Si или Si-O связей или их разрывом.

Предложенные нами наиболее вероятные структурные формы положительных $Si_nO_m^+$ (рис. 3) отличаются от структур отрицательных кластеров $Si_nO_m^-$ [18]. Так, сопоставление реакций распада кластерных ионов $Si_nO_m^-$ и нейтральных кластеров [22] свидетельствует о том, что основные фрагментационные каналы $Si_nO_m^-$, в основном, совпадают с каналами распада нейтралей, имеющих в своём составе на один атом кислорода меньше. Это позволило нам [18] высказать предположение о том, что распыленные отрицательные оксидные кластеры $Si_nO_m^-$ могут быть представлены как комплексный ион с нейтральным ядром вида Si_nO_{m-1} и присоединенным к нему отрицательным кислородом O^-, причём отрицательный кислород, присоединенный к Si_nO_{m-1}, не влияет на свойства кластерного иона. Иначе говоря, нейтральным кластерам Si_nO_{m-1} может быть поставлен в соответствие, согласно [18], отрицательный кластерный ион $Si_nO_m^-$, имеющий ту же структуру и свойства в основном состоянии, но с одним дополнительным атомом кислорода, несущим отрицательный заряд. При этом колебательная энергия возбуждения распыленного комплексного иона и выделение энергии возбуждения на конкретной связи, приводящее в конечном счете к разрыву связей с выбросом из комплекса нейтрального фрагмента, не зависят от O^-. Вместе с тем найденные [18] энергии диссоциации E_d, по крайней мере, наиболее интенсивных, в масс-спектрах «магических» кластеров $Si_nO^-_{2n+1}$ как по абсолютной величине, так и в зависимости от размера кластера n=2–7 очень хорошо совпадают со значениями энергии связи наиболее стабильных кластеров $(SiO_2)_n$, вычисленными МД моделированием в [28].

В то же время вычисления [22] не показывают для этих кластеров заметного прироста энергий связи при увеличении их размера n, т.е. слабо коррелируют как с данными измерений [18], так и с результатами [28].

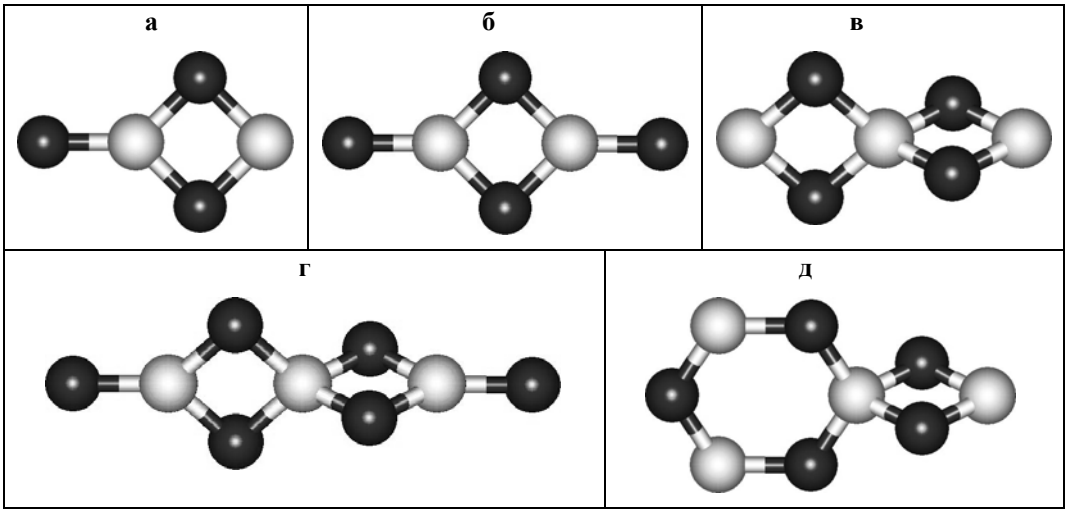


Рис. 3. Вероятные структурные схемы некоторых распыленных кластерных катионов $Si_nO_m^+$ на основе структур соответствующих нейтральных кластеров Si_nO_m [22] в основном состоянии (серый цвет – атомы Si, черный – атомы O): $Si_2O_3^+$ (а); $Si_2O_4^+$ (б); $Si_3O_4^+$ (в); $Si_3O_6^+$ (г); $Si_4O_5^+$ (д).

Хотя каналы распадов распыленных кластерных ионов $Si_nO_m^-$ [18] подобны фрагментационным каналам соответствующих нейтралей Si_nO_{m-1} [22], для отрицательных кластеров $(Si_nO_{2n+1})^-$ более предпочтительными представляются структуры [18] (рис. 4), полученные на основе [28] с добавлением O^-. Для положительно заряженных $Si_nO_m^+$ кластеров, как указывалось выше, более вероятными представляются структуры, аналогичные описанным в [22] структурам соответствующих нейтральных Si_nO_m с наименьшей энергией.

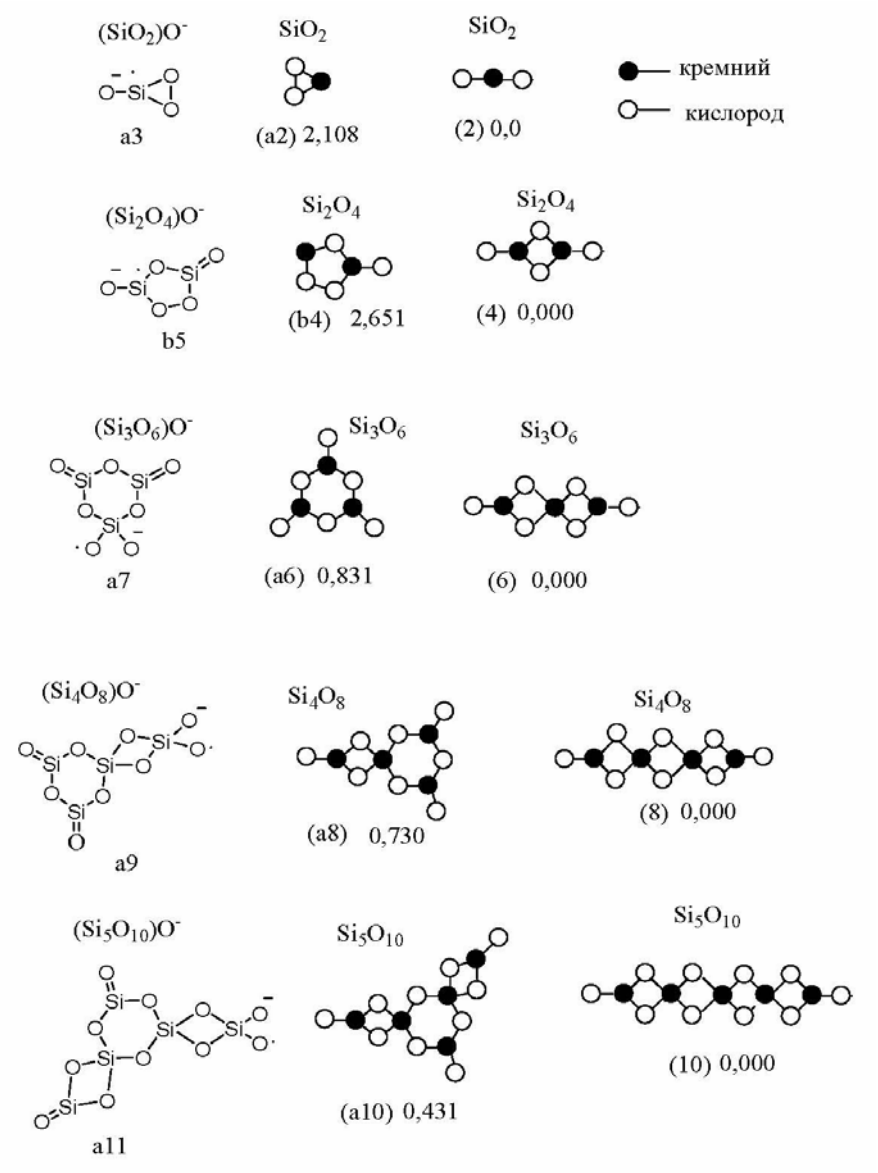


Рис. 4. Вероятные структурные схемы [18] распыленных “магических" кластерных анионов $(SiO_2)_nO^-$ (n=1–5) и теоретически рассчитанных нейтралей $(SiO_2)_n$ [22, 28] с относительными энергиями в эВ по [22].

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследования методом ВИМС положительно заряженных кластеров $Si_nO_m^+$, синтезированных при ионном распылении поверхности, позволяют определить их основные фрагментационные каналы и найти их энергии диссоциации. Сравнение полученных результатов с литературными данными теоретических расчётов кластеров оксида кремния позволяет высказать предположение, что структуры распыленных катионов $Si_nO_m^+$, по-видимому, совпадают со структурами аналогичных нейтралей Si_nO_m в основном состоянии. В то же время возможные структуры $Si_nO_m^+$ отличаются от наиболее вероятных структур анионов $Si_nO_m^-$, для которых характерны изомеры, соответствующие нейтральным Si_nO_m в состояниях с большими значениями потенциальной энергии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства инновационного развития Республики Узбекистан (контракт №ОТ-Ф3-11).

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Stöber, A. Fink, E. Bohn, Colloid Interface Sci. **26**, 62 (1968).
2. B.D. Karmaker, G. De, D. Ganguli, J. Non-Cryst. Solids **272**, 119 (2000); https://doi.org/10.1016/S0022-3093(00)00231-3
3. F. Volmer, D. Braun, A. Libchaber, M. Khoshsima, I. Teraoka, S. Arnold, Appl. Phys. Lett. **80,** 4057 (2002); https://doi.org/10.1063/1.1482797
4. I.M. White, N.M. Hanumegowda, X. Fan, Opt. Lett. **30,** 3189 (2005); https://doi.org/10.1364/OL.30.003189
5. K.J. Vahala, Nature **424,** 839 (2003); https://doi.org/10.1038/nature01939
6. S.M. Spillane, T.J. Kippenberg, K.J. Vahala, Nature **415,** 621 (2002); https://doi.org/10.1038/415621a
7. V. Cai, O. Painter, K.J. Vahala, P.C. Sercel, Opt. Lett. **25,** 1430 (2000); https://doi.org/10.1364/OL.25.001430
8. R. Fenollosa, M. Ibisate, S. Rubio, C. Lopez, J. Sanchez-Dehesa, J. Appl. Phys. **93,** 671; (2003). DOI: 10.1063/1.1525399
9. М.Х. Ашуров, Б.М. Абдурахманов, М.М. Адилов, Х.Б. Ашуров, Докл. АН РУз № 3**,** 45 (2010).
10. Б.М. Абдурахманов, Б.Л. Оксенгендлер, Докл. АН РУз № 1**,** 26 (2011).
11. B.M. Abdurakhmanov, M.M. Adilov, M.Kh. Ashurov, Kh.B. Ashurov, S.E. Maksimov, B.L. Oksengendler, Appl. Sol. Energy **48** (2), 79 (2012); DOI:10.3103/S0003701X12020028
12. B.L. Oksengendler, Kh.B. Ashurov, B.M. Abdurakhmanov, S.E. Maksimov, Appl. Sol. Energy **49(2)**, 70 (2013); https://doi.org/10.3103/S0003701X13020102
13. B.M. Abdurakhmanov, M.M. Adilov, M.Kh. Ashurov, Kh.B. Ashurov, Sh.K. Kuchkanov, S.E. Maksimov, B.L. Oksengendler, Appl. Sol. Energy **51** (4), 253 (2015); https://doi.org/10.3103/S0003701X15040039
14. Б.М. Абдурахманов, М.Х. Ашуров, Х.Б. Ашуров, Ш.К. Кучканов, С.Е. Максимов, С.Ж. Ниматов, Узбек. физич. журн. **16**, № 3, 219 (2014).
15. М.Х. Ашуров, Б.М. Абдурахманов, Х.Б. Ашуров, С.Е. Максимов, Б.Л. Оксенгендлер, Докл. АН РУз № 4, 16 (2015).
16. И.П. Суздалев. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов (Москва, Ком. Книга, 2006).
17. A.D. Bekkerman, N.Kh. Dzhemilev, V.M. Rotstein, Surf. and Interf. Anal. **15**, 587 (1990).
18. Н.Х. Джемилев, Л.Ф. Лифанова, С.Е. Максимов, О.Ф. Тукфатуллин, Ш.Т. Хожиев, Узбек. физич. журн. **9** № 5-6, 325 (2007).

19. С.Е. Максимов, Н.Х. Джемилев, Л.Ф. Лифанова, О.Ф. Тукфатуллин, Ш.Т. Хожиев, Поверхность **5,** 54 (2008).
20. N.Kh. Dzhemilev, S.F. Kovalenko, L.F. Lifanova, S.E. Maksimov, Sh.T. Khojiev, Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics **72**, № 7, 910 (2008); DOI:10.3103/S1062873808070095
21. N.Kh. Dzhemilev, S.F. Kovalenko, S.E. Maksimov, O.F. Tukfatullin, Sh.T. Khojiev, Journal of Surface Investigation **11**(3), 490 (2017); DOI: 10.1134/S1027451017010074
22. W.C. Lu, C.Z. Wang, V. Nguen, M.W. Gordon, K.M. Ho, J. Phys. Chem. A **107**, 6936 (2003); doi:10.1021/jp027860h.
23. П. Робинсон, К. Холбрук. Мономолекулярные реакции (Москва, Мир, 1975).
24. С.Е. Максимов, С.В. Верхотуров, В.В. Соломко, Узбек. физич. журн. **6** № 2, 96 (2004).
25. C.E. Klots, Z. Phys. D **5**, 83 (1987).
26. C. E.Klots, Z. Phys. D **21**, 335 (1991).
27. M. Jadraque, M. Santos, L. Díaz, J. Alvarez-Ruiz, M. Martín, J. Phys. Chem. A **113** (41), 10880 (2009); doi: 10.1021/jp906084p
28. J.A. Harkless, D.K. Stillinger, F.H. Stillinger, J. Phys. Chem. **100**, 1098 (1996).

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.293-298

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ БОМБАРДИРОВКИ ИОНАМИ AR^+ НА СПЕКТР ВАЛЕНТНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ МОНОКРИСТАЛЛА SI(111)

Б.Е. Умирзаков, Ё.С. Эргашов

Ташкентский государственный технический университет, 100095 Ташкент, Узбекистан
yergashev@mail.ru
(Получена 03.04.2019)

Мақолада монокристалл кремнийнинг электрон ва оптик хусусиятларига сирт қатлами тартибсизлигининг таъсири ўрганилди. Фотоэлектрон спектрлар таҳлилининг кўрсатишича, сиртнинг тўлиқ аморфизацияланиши натижасида Si валент электрон зичлиги ҳолати сезиларли ўзгаради. Хусусан, Si(111)нинг асосий валент электронлар максимуми 0.4 эВ га катта боғланишли энергия томонга силжийди ва тақиқловчи соҳа E_g кенглиги 0.1–0.15 эВ га ортади. Олинган экспериментал натижаларнинг назарий асослари келтирилган. Шунингдек, сирт қатламларининг тартибсизлиги оптик хусусиятларга таъсири ҳам ўрганилган.

В работе исследовано влияние разупорядочения приповерхностных слоев на электронные и оптические свойства монокристаллического кремния. Анализ спектров фотоэлектронов показал, что при полной аморфизации поверхности плотность состояний валентных электронов Si существенно изменяется. В частности, положение основного максимума электронов валентной зоны Si(111) смещается на ~0.4 эВ в сторону больших энергий связи, и ширина запрещенной зоны E_g увеличивается на 0.1–0.15 эВ. Дано теоретическое обоснование полученных экспериментальных результатов. Изучено также влияние разупорядочения поверхностных слоев на оптические свойства.

In the paper, the effect of disordering of the surface layers on the electronic and optical properties of single-crystal silicon has been studied. An analysis of the photoelectron spectra shows that with complete amorphization of Si surface the state density of valence electrons has been significantly changed. In particular, the position of main maximum of the valence band electrons of Si(111) has been shifted by ~0.4 eV towards the higher binding energies, and the band gap E_g increases by 0.1–0.15 eV. The theoretical substantiation of the experimental results obtained is given.The effects of the disordering of the surface layers on the optical properties were also studied.

Введение. Экспериментальные и теоретические исследования, приведенные в работах [1-5], показали, что напыление атомов, имплантация ионов, лазерное облучение и другие воздействия на кристаллы приводят к резкому изменению электронной (параметры зон, плотности заполненных и свободных электронных состояний) и кристаллической структуры поверхностной области. Эти изменения в основном обусловлены формированием наноразмерных структур, изменением стехиометрического состава и фазовой структуры приповерхностного слоя. Особый интерес представляет изучение процессов образования нанокристаллов и зависимости их физических свойств от наличия структурных дефектов [1, 6, 7]. Любое изменение физико-химического состояния поверхности (появление вакансий и межузельных атомов, внедрение или замещение внедренной примеси, появление активных центров, разупорядочение, образование соединений и др.), прежде всего, приводит к изменению плотности состояний валентных электронов,

которое отражается в экспериментальном спектре фотоэлектронов: изменение интенсивности, формы и энергетического положения существующих пиков или их исчезновение и появление новых пиков [7, 8]. Изучение этих изменений важно при разработке многослойных нанопленочных МДП и ПДП структур, электронных и оптических приборов, в том числе солнечных элементов.

Основной целью данной работы является экспериментальное изучение влияния разупорядочения кристаллической решетки поверхности монокристаллического Si(111) на его электронную структуру и оптические свойства, а также теоретическое объяснение полученных экспериментальных результатов.

Методика эксперимента. Объектом исследования является монокристаллический Si(111) *p*-типа. Разупорядочение поверхности Si(111) осуществляли бомбардировкой ионами Ar^+ с энергией E_0=1 кэВ с вариацией дозы ионов в пределах 10^{13}–10^{16} $см^{-2}$. Состав поверхности контролировали методом оже-электронной спектроскопии (ОЭС). Для изучения изменения параметров энергетических зон и плотности состояний валентных электронов Si(111) при ионной бомбардировке использовали методы ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии (УФЭС) и измерения интенсивности I проходящего через образец света (коэффициент пропускания света K). Профили распределения атомов по глубине исследовали методом ОЭС в сочетании с травлением поверхности ионами Ar^+ с E_0=1 кэВ под углом ~80° относительно нормали. Отжиг, ионную бомбардировку, напыление атомов и все измерения проводили на одной и той же экспериментальной установке при вакууме не хуже 10^{-6} Па. Степень разупорядочения поверхности оценивали по картинам дифракции быстрых электронов.

Результаты и обсуждение. Перед ионной бомбардировкой поверхность Si(111) очищали длительным прогревом при T=1200 К и кратковременным прогревом до T=1500 К в сочетании с мягким травлением поверхности ионами Ar^+. Общая концентрация примесных атомов С и О на поверхности не превышала 0.5–1 ат.% и практически не влияла на структуру спектра фотоэлектронов.

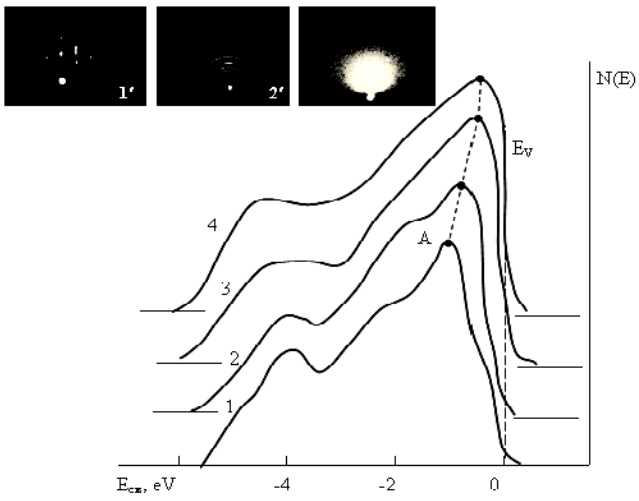


Рис. 1. Спектр фотоэлектронов и ДБЭ (вставка) изображения поверхности Si(111), бомбардированной ионами Ar^+ с E_0=1 кэВ при различных дозах D, $см^{-2}$: *1* и *1′* – 0, *2* и 2′ – 2×10^{14}, *3* – 3×10^{15}, *4* и *4′* – 10^{16}.

На рис. 1 приведены динамика изменения спектра (кривой энергетического распределения (КЭР)) фотоэлектронов и ДБЭ изображения (на вставке) поверхности Si(111) при бомбардировке ионами Ar^+ с E_0=1 кэВ разными дозами. Бомбардировку Ar^+ проводили перпендикулярно к поверхности. В основном будем рассматривать изменение положения и формы основного пика А кремния.

Из рис. 1 видно, что с ростом дозы облучения происходит уширение пика А, уменьшение его амплитуды и смещение положения в сторону больших энергий (к верхнему краю валентной зоны E_v). При этом поверхность Si от монокристаллической структуры постепенно переходит в сильно разупорядоченное аморфное состояние (см. вставки на рис. 1). При ионной бомбардировке состав поверхности Si практически не меняется, поэтому наблюдаемые изменения в основном объясняются разупорядочением поверхности и приповерхностных слоев. При D=6×10^{15} см$^{-2}$ происходит полная аморфизация (рис. 2). Однако все особенности, характерные для аморфного Si, устанавливались при D=6×10^{16} см$^{-2}$, и дальнейшее увеличение D практически не приводит к изменению спектра фотоэлектронов.

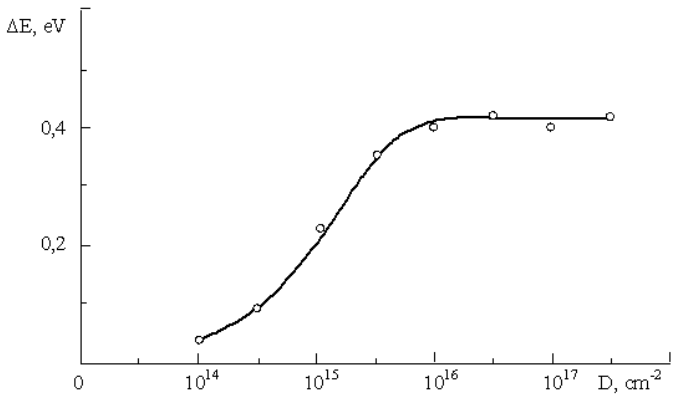


Рис. 2. Дозная зависимость энергетического сдвига основного пика кремния.

В таблице представлены значения ширины запрещенной зоны E_g и коэффициента пропускания света K для монокристалла Si(111), измеренные до и после аморфизации поверхности.

Таблица. Значения E_g и K для Si(111), измеренные до и после разупорядочения поверхности.

Образец	Структура поверхности	E_g, эВ	K, %	
			$h\nu$=0.8 эВ	$h\nu$=1.5 эВ
Si(111)	Монокристалл	1.1	85±5	5±1
$Ar^+ \rightarrow$Si(111)	Аморфная	1.25	40±5	5±1

Из таблицы видно, что при разупорядочении поверхности ширина запрещенной зоны E_g немного увеличивается. Несмотря на это, значение K при $h\nu<E_g$ существенно уменьшается (следовательно, коэффициент поглощения увеличивается), что в основном обусловлено появлением и увеличением

концентрации различных энергетических уровней в запрещенной зоне вследствие разупорядочения поверхности.

Практическое использование Si всегда связано с контактом его поверхности с атомами различных газов (в случае солнечных элементов, оптических приборов и др.) и твердого тела (в случае МДП, ПДП структур и сверхтонких контактов). Для выяснения влияния разупорядочения поверхности Si на глубину проникновения атомов контактирующего материала мы исследовали профили распределения атомов Mn по глубине на границе системы Mn-Si. Mn толщиной ~400 Å напыляли на чистую и ионно-бомбардированную поверхность Si(111). На рис. 3 приведено изменение интенсивности оже-пика Mn с энергией 590 эВ по глубине Si(111) до и после разупорядочения его поверхности. Видно, что наличие разупорядоченного слоя, как в случае нанопленок $CoSi_2$ [6], существенно уменьшает (на 100–150 Å) глубину проникновения атомов контактирующего металла (Mn) в кремний.

Теперь попытаемся объяснить изменение плотности состояний валентной зоны Si(111) в процессе разупорядочения поверхности с теоретической точки зрения. На основе рис. 1 построена зависимость энергетического сдвига ΔE основного пика A кремния от дозы ионов Ar^+ (рис. 3). Видно, что наибольший сдвиг пика A, обусловленный аморфизацией приповерхностного слоя, составляет 0.4–0.45 эВ.

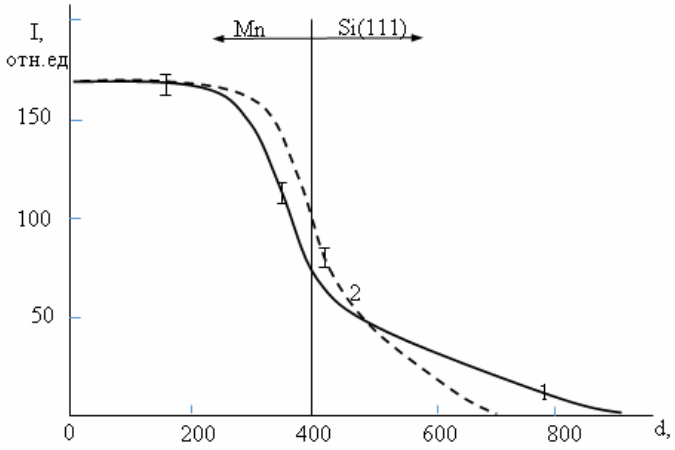


Рис. 3. Зависимость $I_{Оже}$ от глубины системы Mn-Si(111) до (кривая *1*) и после (кривая *2*) бомбардировки ионами Ar^+ с E_0=1 кэВ при дозе D=6×10^{16} см$^{-2}$.

Известно [9, 10], что состояние электрона в монокристалле кремния описывается в блоховском представлении функцией Грина $G_0(\omega,k)$, где ω – частота падающего света, K – квазиимпульс электрона в схеме расширенных зон. Функция Грина электрона в аморфном веществе $G_{kk'}$ удовлетворяет интегральному уравнению Шредингера:

$$\hat{G}_{kk'} = G_0(k)\delta_{kk'} + G_0(k)\sum \hat{V}_{kk'}\hat{G}_{k'k} \ , \qquad (1)$$

где $\hat{V}_{kk'}$ – матричный элемент случайного потенциала, действующего на электрон со стороны хаотически расположенных атомов вещества. Суммирование по k производится по всем состояниям электронов в кристалле; k описывают валентную зону монокристаллического кремния, а k' описывает зону, соответствующую

ионно-бомбардированному (аморфному) кремнию; δ – дельта-функция Дирака, выражающая закон сохранения энергии при поглощении фотона. Усредняя уравнение (1) по хаотическому распределению примесей, получаем уравнение для функции Грина G′=<G> валентной зоны кремния

$$G'_{kk'} = G_0(k) + G_0(k) M_{kk} G'_{kk}, \qquad (2)$$

где M_{kk} – массовый оператор, представляющий собой усреднённый эффективный комплексный потенциал, действующий на электрон со стороны хаотически расположенных атомов. Вещественная часть этого потенциала определяет сдвиг максимума плотности состояний, а мнимая часть – уширение пиков. Уширение пиков в данной статье не рассматривается. Во втором порядке теории возмущений сдвиг максимумов в результате аморфизации пропорционален среднему значению квадрата модуля случайного потенциала V:

$$M_{kk} = N \int \frac{dk'' < \left|\hat{V}_{kk}\right|^2 >}{(2\pi)^3 (\varepsilon_k - \varepsilon_{k''})}, \qquad (3)$$

где N – концентрация дефектов, $< \left|\hat{V}_{kk}\right|^2 >$ – среднеквадратичная флуктуация случайного потенциала взаимодействия. Интеграл в (3) понимается в смысле главного значения. Энергия валентного электрона в аморфизированном кремнии ε'_k равна

$$\varepsilon'_k = \varepsilon_k + M_{kk}, \qquad (4)$$

где ε_k – энергия электрона в валентной зоне чистого кристаллического кремния. Смещение энергетических положений пиков определяется величиной M_{kk}, рассчитываемой по формуле (3).

Оценка показывает, что при малых концентрациях примеси, т.е. при малых дозах бомбардировки ($D<10^{15}$ см$^{-2}$) потенциал M_{kk} и, следовательно, сдвиг максимума плотности состояний меняются линейно по концентрации. При больших концентрациях примеси (дозах $D>10^{15}$ см$^{-2}$), соответствующих переходу к аморфному кремнию, зависимость M_{kk} от концентрации очень слабая.

Важно отметить, что величина M_{kk} положительна, поскольку основной вклад в интеграл (3) дает состояние k', энергия которого меньше, чем энергии ε_k. Поэтому при аморфизации рассматриваемый нами пик А плотности состояний валентной зоны кремния смещается в область меньших значений энергии связи электрона. Эти теоретические результаты согласуются с экспериментальными данными, приведенными на рис. 1 и 3. Величина сдвига энергии составляет ~0.4 эВ.

Таким образом, в работе экспериментально установлено существенное изменение плотности электронных состояний валентной зоны монокристаллического Si(111) при аморфизации его поверхности ионной бомбардировкой. В частности, ионная бомбардировка приводит к смещению положения основного максимума А энергетического спектра Si(111) на ~0.4–0.45 эВ в сторону большей энергии, что согласуется с теоретическими представлениями. Показано, что полное разупорядочение поверхностных слоев Si приводит к некоторому росту E_g, увеличению на 15–20% коэффициента поглощения света при $h\nu \le E_g$, существенному уменьшению (в 1.5 и более раза) глубины диффузии атомов контактирующего материала в мишень.

ЛИТЕРАТУРА

1. Б.Е. Умирзаков, Д.А. Ташмухамедова, М.К. Рузибаева, А.К. Ташатов, С.Б. Донаев, Б.Б. Мавлянов, Журнал технической физики **83**, вып. 9, 146 (2013). B.E. Umirzakov, D.A. Tashmukhamedova, M.K. Ruzibaeva, A.K. Tashatov, S.B. Donaev, B.B. Mavlyanov, Technical Physics **58**, 9, 1383 (2013).
2. С.Е. Кулкова, С.В. Еремеев, А.В. Постников, Д.И. Бажанов, Б.В. Потапкин, Физика и техника полупроводников **41**, вып. 7, 832 (2007).
3. P. Mutti, G. Ghislotti, S. Pertori, G.F. Cerofolini, L. Meda, E. Grilli, M. Guzza, Appl. Phys. Lett. **66**, 851 (1995).
4. Г.А. Качурин, С.Г. Черкова, Д.В. Марин, А.К. Гутаковский, А.Г. Черков, В.А. Володин, Физика и техника полупроводников **42**, вып. 9, 1145 (2008).
5. Ё.С. Эргашов, Журнал технической физики **87**, вып. 5, 758 (2017). Y.S. Ergashov Technical Physics **62**, 5, 777 (2017).
6. П.Г. Петросян, Н. Григорян, Журнал технической физики **87**, вып. 3, 443 (2017).
7. Д.М. Муродкобилов, Д.А. Ташмухамедова, Б.Е. Умирзаков, Поверхность №10, 58 (2013). D.M. Muradkabilov, D.A. Tashmukhamedova, B.E. Umirzakov, Journal of Surface Investigation **7**, 5, 967 (2013).
8. В.К. Адамчук, С.И. Федосенко, Изв.АН СССР, сер.физ. **43**, №3, 523 (1979).
9. Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Статистическая физика. Часть II (Москва, Наука, 1978).
10. П. Маттук. Фейнмановские диаграммы проблемы многих тел (Москва, Мир, 1969).

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.299-302

ИССЛЕДОВАНИЯ ДЕФЕКТНОЙ ПОВЕРХНОСТИ InP(001) МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РАССЕЯНИЯ ИОНОВ

Н.Ю. Тураев[1], М.К. Каримов[2], М.К. Курбанов[2], М.У. Отабоев[2], У.О. Кутлиев[2]

[1]Учебный центр «ФАНУМ» АН РУз, Ташкент, Узбекистан
[2]Ургенчский государственный университет, Ургенч, Узбекистан, karimov_m_k@mail.ru
(Получена 27.05.2019)

Мақолада InP(001) сиртидаги кичик индексли йўналишларга кичик бурчак остидан тушган Ar^+ ионларининг сочилишидаги энергетик тақсимоти келтирилган. Олинган энергетик тақсимотда ярим канал, атом қатори ва нуқсонларга мос келувчи чўқилар кузатилган. Олинган натижалар яримўтказгичлар сиртини ўрганишда муҳим аҳамиятга эга.

Представлены энергетические распределения рассеянных ионов Ar^+ в низкоиндексном направлении монокристалла InP(001) при малоугловом падении на эту поверхность. В энергетическом распределении наблюдаются пики, относящиеся к полуканалам, атомным цепочкам и дефектам. Наши результаты интересны при изучении поверхностных структур полупроводников.

In this work the energy distributions of Ar^+ ions scattering by the surface InP(001) in low indexing directions at the grazing incidence of bombarding ions are presents. In energy distributions the peaks which corresponding to the ions scattered from semichannel, surface atomic chains and defects are observed. Our results are interesting at the study of structure semiconductor surfaces.

Введение. Исследование взаимодействия ионов с поверхностью является одним из основных направлений в физической электронике. В результате облучения поверхности ионами происходит множество процессов: распыление, рассеяние, эмиссия электронов и квантов, имплантация. В этом ряду изучение рассеяния весьма важно для выяснения закономерностей взаимодействия в системе ион-поверхность твердого тела, а также для развития методов элементного и структурного анализа. Следует отметить, что к числу наименее изученных относятся также процессы взаимодействия ускоренных ионов с поверхностью твердых тел и их рассеяние. Исследование закономерностей этих процессов основано на анализе формы энергетических распределений рассеянных частиц, которые достаточно сложны даже для идеальных кристаллов, так как определяются большим числом коррелированных столкновений. Задача становится еще более сложной из-за наличия в реальных мишенях различных дефектов на поверхности многокомпонентных кристаллов, а также из-за изменения бомбардируемой мишени со временем. Очевидно, что решение этой задачи, требующей громоздких расчетов, невозможно в аналитическом виде, и поэтому единственным эффективным способом расчета является метод компьютерного моделирования.

Последние годы использование ионных пучков для диагностики поверхностей монокристаллов типа A^3B^5 интенсивно развивается. Особый интерес представляет фосфид индия (InP), поскольку энергетические параметры его монокристаллической фазы близки к параметрам монокристаллического кремния, и на его

основе легко изготавливать приборы интегральной оптоэлектроники, совместимые с кремнием, в частности, резистивные оптопары [1].

Как известно, при рассеянии ионов поверхностью под небольшими углами высока вероятность появления отраженного потока частиц, испытавших многократные соударения с атомами мишени. С помощью компьютерного моделирования [1] показано, что учет многократного рассеяния при малых углах скольжения влияет на значения неупругих потерь энергии, определяемых из положения пика квазиоднократного рассеяния.

Для изучения дефектных структур с помощью копьютерного моделирования нами смоделирован процесс малоуглового рассеяния ионов Ar^+ с начальной энергией 3 и 5 кэВ дефектной поверхностью монокристалла InP (001) <110> и <ī10>.

Метод исследования и результаты. При малых значениях энергий ионно-атомные столкновения на поверхности твердого тела можно рассматривать как последовательности изолированных парных столкновений. Траектории сталкивающихся частиц определяются в первом приближении силами упругого взаимодействия атомов. Это кулоновские силы взаимодействия ядер и электронов атомов, которые действуют на атомных расстояниях между взаимодействующими частицами. Для расчета траектории налетающего иона необходимо рассмотреть его взаимодействие с совокупностью атомов кристаллической решетки одновременно. Однако при не очень низких энергиях столкновения иона с атомом кристалла можно ограничиться рассмотрением изолированных парных столкновений частиц.

При математическом моделировании процесса рассеяния ионов средних и малых энергий в широком интервале углов падения и рассеяния нами использованы закономерности столкновения двух тяжелых частиц. Итак, будем рассматривать рассеяние пучка ионов от поверхности монокристаллического образца на основе модели парных одно, двух и т.д. многократных соударений [2-3].

На приближении парных столкновений основаны две базовые программы, при помощи которых моделируют широкий круг процессов, вызываемых бомбардировкой твердых тел ускоренными частицами – программа MARLOWE и программа TRIM. В основе обеих программ лежит практически один и тот же формализм. Различие между этими программами состоит в том, что первая исходно оперирует с кристаллическими мишенями, тогда как вторая с аморфными. Для оценки неупругой потери энергии в элементарном акте столкновения мы использовали модифицированный потенциал Кишиневского [4]:

$$\varepsilon(E_0,P)=\frac{0.310^{-7}\nu Z_1(Z_1^{1/2}+Z_2^{1/2})(Z_1^{1/6}+Z_2^{1/6})}{(1+\frac{0.67\sqrt{Z_1}r_0}{a_{tf}(Z_1^{1/6}+Z_2^{1/6})})}+(1-0.68\frac{V(r_c)}{E_r}),$$

где a_{tf} = 0.468 Å, ν (см/с) и E_r (эВ) – относительная скорость и энергия атома, Z_1 и Z_2 – заряд сталкивающихся иона и атома, r измеряется в ангрестремах.

Полупроводниковые соединения типа InP(001) имеют кристаллическую структуру с тетраэдрическими связями (структура цинковой обманки ZnS). На поверхности этих полупроводников образуются полуканалы, которые отличаются геометрическими параметрами и сортами атомов. Атомы индия и фосфора

расположены послойно, т.е. на поверхности могут находиться атомы только индия или только фосфора.

Такое расположение атомов даёт возможность рассматривать поверхность, в одном случае покрытую атомами индия, а в другом – атомами фосфора. Здесь мы представляем энергетические распределения для случая, когда поверхность покрыта атомами фосфора.

На рис. 1 изображен энергетический спектр рассеянных ионов Ar^+ на дефектной InP(001) <110> поверхности при бомбардировке с энергией E_0= 3 и 5 кэВ. Отметим, что при E_0=3 кэВ наблюдался только один пик, соответствующий рассеянным ионам с атомной цепочки. При E_0=5 кэВ в спектре видны отчетливые пики рассеянных ионов на поверхностных атомных цепочках (в высокоэнергетической части спектра) и полуканалах (в низкоэнергетической части спектра), а также на дефектах. Отметим, что эти пики обусловлены многократными столкновениями в твердом теле, когда в первом соударении ион передает часть своей кинетической энергии атому мишени.

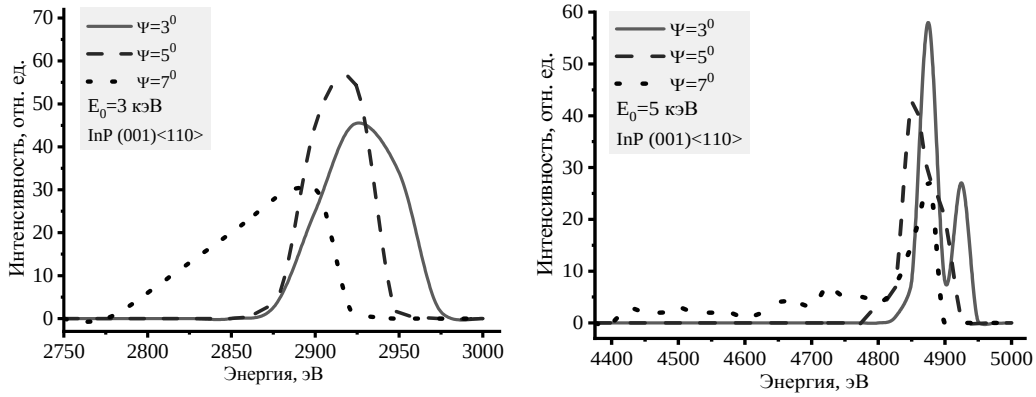


Рис. 1. Энергетический спектр рассеянных ионов Ar^+ с энергией E_0= 3 кэВ (слева) и 5 кэВ (справа) поверхностью InP(001)<110> при ψ=3°, 5°, 7°.

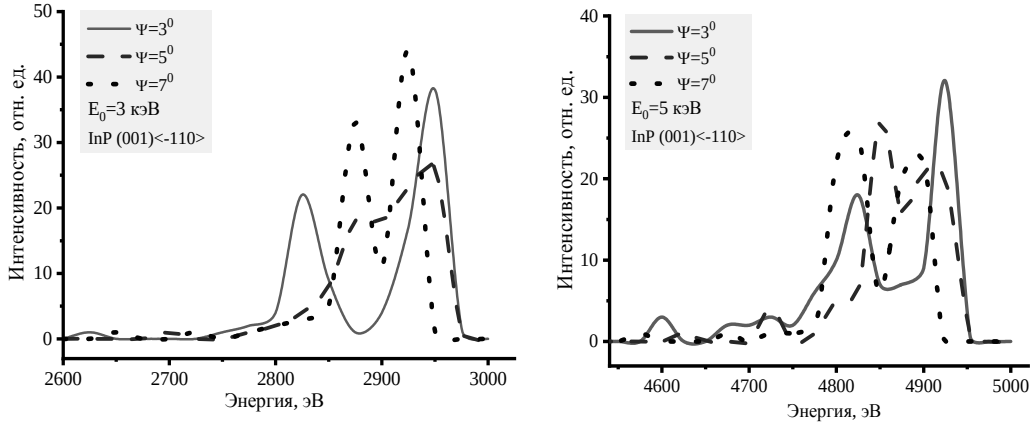


Рис. 2. Энергетический спектр рассеянных ионов Ar^+ с энергией E_0= 3 кэВ (слева) и 5 кэВ (справа) поверхностью InP(001) <$\bar{1}$10> при ψ=3°, 5°, 7°.

На рис. 2 представлен энергетический спектр рассеянных ионов Ar^+ на дефектной InP (001)<ī10> поверхности при бомбардировке с энергией E_0= 3 и 5 кэВ. Видно, что при малых углах бомбардировки образуются пики, обусловленные атомной цепочкой, полуканалом и дефектом. Пики, обусловленные рассеянием на полуканале, объясняются большим размером полуканала, образованного в направлении <ī10>, и отсутствием в этом полуканале стенки в дефектной части поверхности. Сравнение этих энергетических спектров показывает, что геометрические параметры полуканала влияют на интенсивность и энергию рассеянных частиц.

Из рисунков видно, что в случае <110> интенсивность пиков, обусловленных рассеянием ионов на полуканалах, больше, чем интенсивность ионов, рассеянных на поверхностных атомных цепочках. А в случае <ī10> интенсивность пика ионов, рассеянных на поверхностных атомных цепочках, больше, чем интенсивность ионов, рассеянных на полуканале. Следует отметить, что пик ионов, рассеянных на поверхностных дефектах, более заметен в направлении <ī10>, так как в этом направлении из-за большой ширины наблюдаются большие потери энергии на дефектной части поверхности.

Заключение. Рассчитаны энергетические распределения малоуглового рассеяния ионов Ar^+ на дефектной поверхности монокристалла InP(001) в направлениях <110> и <ī10>. Показано, что в энергетическом распределении рассеянных на дефектных поверхностях ионов можно четко выделить вклад рассеянных на приповерхностной дефектной части ионов, которые образуют несколько дискретных пиков в низкоэнергетической части спектра. Установлено, что при малоугловом рассеянии ионов на дефектах наблюдаются потери энергии, обусловленные в основном неупругими столкновениями.

ЛИТЕРАТУРА

1. A.A. Dzhurakhalov, F.F. Umarov, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B **136-138**, 1092 (1998).
2. У.О. Кутлиев, М.К. Каримов, М.У. Отабоев, Физика и химия обработки материалов № 1, 5 (2019).
3. U. Kutliev, M. Karimov, B. Sadullaeva, M. Otaboev, An International Journal of Advanced Computer & Engineering Technology (India) **VII**, Issue IV, 2749 (2018).
4. E.S. Parilis, L.M. Kishinevsky, N.Yu. Turaev, B.E. Baklitzky, F.F. Umarov, V.Kh. Verleger, S.L. Nizhnaya, and I.S. Bitensky. Atomic Collisions on Solid Surfaces (NorthHolland, Amsterdam, 1993).

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.303-309

ГРАНУЛИРОВАННЫЙ КРЕМНИЙ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПРЕОБРАЗОВАТЕЛЕЙ ТЕПЛОВОЙ ЭНЕРГИИ

Б.М. Абдурахманов, М.М. Адилов, Х.Б. Ашуров, М.Ш. Курбанов

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан
(Получена 13.06.2019)

Грануланган кремнийдан исссиқлик энергияси ўзгартиргичлари тайёрлашда материал сифатида фойдаланишнинг имконияти ва истиқболи муҳокама қилинган. Металлургик кремний ва яримўтказгич ишлаб чиқаришдаги чиқиндилар хом-ашё сифатида хизмат қилиши мумкин бўлган грануланган кремний заррачалари бир-бирига механик равишда туташтирилганда икки компонентли «электронли кристалл–фононли шиша» муҳити вариантини ифодалаши кўрсатилган.

Обсуждается возможность и перспективность использования в качестве материала для изготовления преобразователей тепловой энергии гранулированного кремния, механически приведенные в соприкосновение друг с другом частицы которого представляют собой вариант двухкомпонентной среды «электронный кристалл–фононное стекло», сырьем для создания которых могут служить отходы полупроводникового производства и металлургии кремния.

The possibility and prospects of using of granular silicon as a material for the manufacture of thermal energy converters are discussed. It is shown that granular silicon particles mechanically brought into contact with each other are a variant of a two-component medium “electronic crystal-phonon glass”, the raw materials for which can be waste of semiconductor production and silicon metallurgy.

Одно из перспективных направлений решения задачи повышения термоэлектрической добротности (Z) преобразователей тепловой энергии (ПТЭ) природного или техногенного происхождения базируется на создании системы «электронный кристалл-фононное стекло» (ЭК-ФС). Реализация этой идеи, основанной на применении дорогостоящих нанотехнологий [1-3], несмотря на многочисленные эксперименты, пока не привела к заметному повышению Z, хотя согласно теоретическим расчетам для повышения эффективности преобразования тепла природного или техногенного происхождения на этом пути нет никаких препятствий [4]. Другая актуальная задача, существующая в этой области техники, заключающаяся в нахождении более дешевых и доступных материалов для ПТЭ взамен существующих, основанных на применении различных соединений висмута, теллура, а также редкоземельных элементов, вообще далека от своего решения.

Итак, существующие технические решения в этой области столь дороги и (или) ориентированы на чрезвычайно дефицитные материалы, что пока речи не может быть вообще об их применении в так называемой «большой альтернативной энергетике», фотоэлектрическая часть которой уже оперирует с гигаватными мощностями.

По нашему мнению, подкрепленному результатами экспериментов, прогресс, возможно, может быть достигнут путем вовлечения в сферу термоэлектрических

материалов различных модификаций немонокристаллического кремния. Монокристаллы, в силу малого значения коэффициента Зеебека, ~ 44 мкВ/градус, и, наоборот, высоких значений теплопроводности, γ~150 Вт/м·К, независимо от уровня легирования мелкими примесями, в качестве такового не пригодны [5]. Наш подход изначально базировался на обнаруженном нами факте заметного увеличения коэффициента Зеебека у различного вида поликристаллических кремниевых структур [6], факте роста этого показателя с увеличением дефектности образцов и (или) уменьшения размеров зерен поликристаллического кремния, а также на результатах измерения теплопроводности, оцененной на образцах пористого кремния и составляющей от 2 до 40 Вт/ м·К [7], т.е. рекордно малую величину. Затем в [8] нами было показано, что в случаях легирования кремния глубокими примесями и обязательно до высоких концентраций, $N_{кр}$~ 10^{18} $см^{-3}$, что удается только с помощью ионной имплантации или при использовании поликристаллических образцов с как можно меньшим размером зерен, удается обеспечить проявление тепловольтаического эффекта [9-11], заключающегося в генерации носителей заряда с поглощением субзонных фотонов, идущей с участием глубоких энергетических уровней, связанных с соответствующими примесями и дефектами, которыми изобилуют границы зерен поликристаллического кремния, или образцы, подвергнутые ионной имплантации, что и приводит к аномальному росту α, причем независимо от технологии, использованной для создания указанной выше критической концентрации глубоких уровней ($N_{кр}$) [10].

Нетрудно заметить, что оптимальным условием для проявления тепловольтаического эффекта при одновременном снижении теплопроводности является изготовление рабочего тела ПТЭ из гранулированного кремния [12-13], впервые предложенного нами для этих целей, т.е. из кремниевого порошка с заданными зернистостью и уровнем легирования исходного сырья. Главное отличие изделий из гранулированного кремния от подобных, но выполненных методами порошковой металлургии, заключается в том, что частицы порошка в гранулированном кремнии приведены просто в механическое соприкосновение друг с другом без какого-либо разрушения наноразмерной пленки SiO_2, неизбежно возникающей на поверхности кремниевых частиц при их контакте с кислородом воздуха. Нетрудно видеть, что гранулированный кремний представляет собой двухкомпонентную систему, подобную искомой ЭК-ФС, для которой выражение для термоэлектрической добротности имеет вид:

$$Z = \frac{\alpha_з^2 \sigma_n}{\chi_n}.$$

Здесь $\alpha_з$ – коэффициент Зеебека самого зерна, т.е. частицы кремниевого порошка, который, благодаря проявлению тепловольтаического эффекта, можно регулировать размером частиц, дефектностью их поверхности, а также легированием глубокими примесями, в том числе просто выбором кремниевого сырья, в котором имеются подобные примеси, например, применением технического кремния; σ_n – проводимость наноразмерной пленки окисла – параметр, который для увеличения Z нужно максимально увеличить, а χ_n – теплопроводность упомянутой пленки двуокиси кремния, величина которой, как известно, намного меньше таковой у кремния.

На образцах ПТЭ, выполненных из гранулированного кремния с размером частиц 1–30 мкм, нами показана возможность получения при 500 К величины α на уровне 500 мкВ/град, т.е. на порядок выше, чем у монокристаллического кремния, и даже выше, чем у ряда традиционных термоэлектрических материалов [8]. Результаты измерений теплопроводности гранулированного кремния, проведенные по стандартой методике, наоборот, указывают на снижение этого важнейшего термоэлектрического показателя в 7–9 раз по сравнению с монокристаллическим кремнием [12]. Эти результаты получены именно на гранулированном кремнии, т.е. при измерении нагреваемых порошков кремния, частицы которого просто механически прижаты друг к другу с определенным усилием, но не склеены, не спечены и не сплавлены, что принципиально отличает гранулированный кремний от разнообразных поликристаллических модификаций кремния, только внешне подобных ему, для создания которых используются термические процессы, характерные для порошковой металлургии, неизбежно сопровождающиеся нарушением или разрушением окисного слоя на поверхности кремниевых частиц.

Гранулированный кремний был использован в конструкциях конкретных, разработанных и испытанных нами преобразователях тепловой энергии в электричество [13-16], как-то:

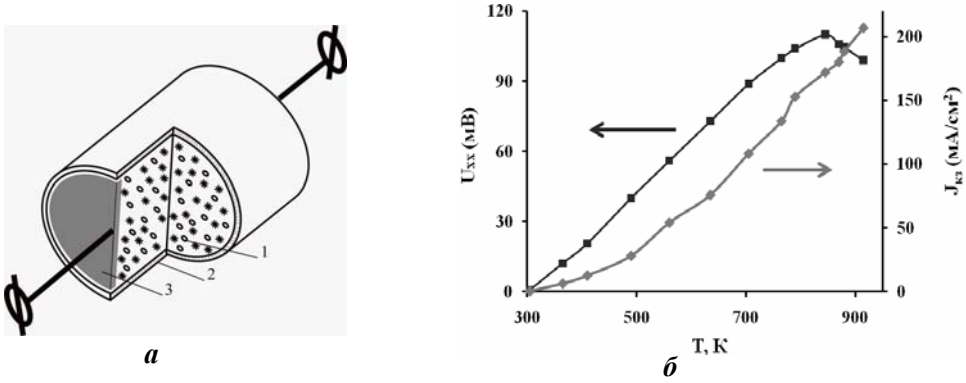
– изотипный ПТЭ с рабочим телом, изготовленным из порошка кремния электронной чистоты *p*- или *n*-типа проводимости;

– изотипный ПТЭ, в рабочем теле которого к порошку кремния электронной чистоты добавлен порошок, полученный размолом отечественного технического кремния (ТК) марки Кр 0 [17];

– ПТЭ, рабочее тело которого имеет области, выполненные из гранулированного кремния с различным типом проводимости;

– преобразователь тепловой составляющей концентрированного солнечного излучения с рабочим телом, изготовленным из гранулированного кремния.

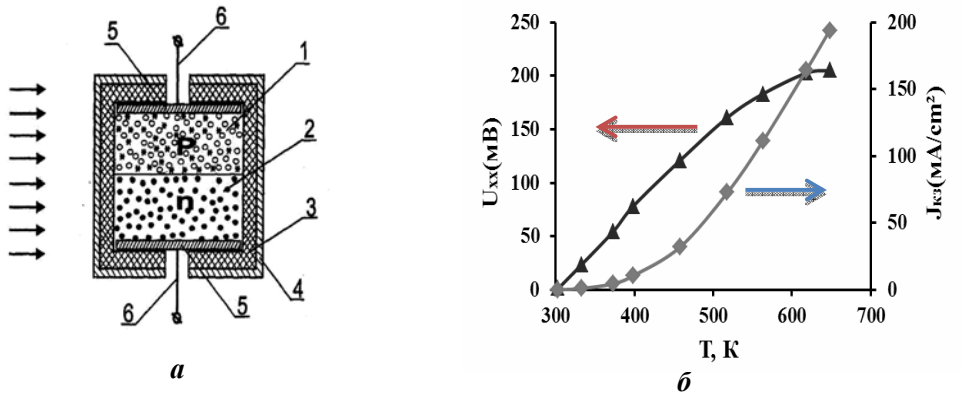
Эти исследования показали, что на данном материале возможно достижение при нагреве, например до 800 К, и обеспечении контролируемого градиента температуры по образцу, напряжения холостого хода ~100 мВ и тока короткого замыкания плотностью ~150 мА /см.^{2}



а *б*

Рис. 1. Разрез изотипного преобразователя тепловой энергия (*а*): 1 – гранулированный кремний, 2 – диэлектрический корпус, 3 –омический контакт. Температурные зависимости U_{xx} и $J_{кз}$ (*б*).

Для иллюстрации изложенного приводим температурные зависимости тока и напряжения, (рис. 1*б*), снятые на нагретом изотипном ПТЭ, схема которого приведена на рис. 1*а*. Данные, полученные на ПТЭ, рабочее тело которого изготовлено из порошков кремния с разным типом проводимости, помещенных в диэлектрический корпус и сдавленных с известным усилием между контактами, выполненными из одинакового металла, приведены на рис. 2*а*,*б*.



а *б*

Рис. 2. Преобразователь тепловой энергии с *p*- и *n*-областями, изготовленными из гранулированного кремния (*а*): *p*-область (1), *n*-область (2), корпус из диэлектрического материала (3), селективное покрытие (4), омический контакт (5), вывод (6). Температурные зависимости напряжения холостого хода и тока короткого замыкания (*б*).

Оба вида описанных выше ПТЭ допускают параллельно-последовательное включение неограниченного количества подобных устройств, т.е. практически ничем не отличаются от известных единичных термоэлектрических элементов, используемых в источниках питания, что иллюстрируют данные таблицы.

Таблица. Последовательное и параллельное соединение преобразователей тепловой энергии на основе гранулированного кремния.

Нагрев	Параметры до соединения.						Параметры при соединении			
	Образец №1 (16)		№2 (17)		№3 (39)		последовательно		параллельно	
T (К)	*U* (мВ)	*I* (мкА)	*U* (мВ)	*I* (мкА)	*U* (мВ)	*I* (мкА)	*U* (мВ)	*I* (мкА)	*U* (мВ)	*I* (мкА)
500	13	180	25.5	362	26.4	208	67.5	247	21.5	745
650	24.4	688	54.4	2800	50.6	1036	128	1222	46.2	4570
800	34	1430	69.7	5970	61.6	2210	164	2570	59.1	9450
900	42.3	2360	70.9	7870	65.8	3548	184	4080	63.5	13250

Таким образом, впервые показано [12-16], что кремний, в том числе технической чистоты, в своей гранулированной модификации может рассматриваться как термоэлектрический материал. На этой основе могут быть созданы полупроводниковые приборы, в данном случае преобразователи тепловой энергии с рабочим телом, находящимся в порошкообразном агрегатном состоянии.

Весьма интересным для практики вариантом сырья для получения гранулированного кремния является не только намеренно измельченный до заданного размера частиц бой кремниевых слитков и пластин, но и использование отходов в виде скраба и шлама с операций резки, шлифовки и полировки кремниевых подложек, используемых в производстве изделий микроэлектроники и солнечной энергетики, объем которых, не поддающихся химико-металлургическому возврату в основное производство [17], может составлять многие сотни тонн. Интересными и разнообразными выглядят и области возможного применения такого рода преобразователей, включая и их использование для преобразования в электричество тепловой составляющей концентрированного солнечного излучения [16].

Анализ полученных нами результатов показывает, что основным препятствием для повышения величины *Z* гранулированного кремния является низкая проводимость материала, зависящая от ряда факторов, в том числе, от усилия сдавливания частиц порошка друг с другом, обусловленная, согласно приведенному выше выражению для *Z*, чрезвычайно малой электропроводностью двуокиси кремния, осуществляемой туннелированием носителей заряда (рис. 3) между гранулами через нанотолщинный слой двуокиси кремния в местах контакта частиц порошка кремния друг с другом.

Проведенный анализ [17] показал, что повышение проводимости в данной двухкомпонентной среде возможно достичь несколькими путями. Один из них основан на впервые предложенном приеме [18] намеренного создания на поверхности SiO_2 локальных нанотолщинных островков проводящего материала, например, из SnO_2, которые могут служить своеобразным «плацдармом» для туннелирующих носителей заряда. Другой путь, также предлагаемый для данной области техники впервые [19], – это организация не гамовского, а резонансного туннелирования носителей заряда, для чего в слое SiO_2 необходимо создать энергетические уровни у дна зоны проводимости окисла, отвечающие определенным условиям, подробно физически обоснованными в [18, 20]. Там же были предложены варианты технологий по созданию энергетических уровней в запрещенной зоне двуокиси кремния, в том числе путем радиационного воздействия с заданной дозой и введением в SiO_2 примесей типа молибдена, хрома, свинца и других химических элементов, обусловливающих возникновение центров окраски в силикатных стеклах. Реализация этих технологий позволит обеспечить возможность регулировать проводимость наноразмерных пленок на поверхности частиц гранулированного кремния и приведет к существенному повышению *Z*.

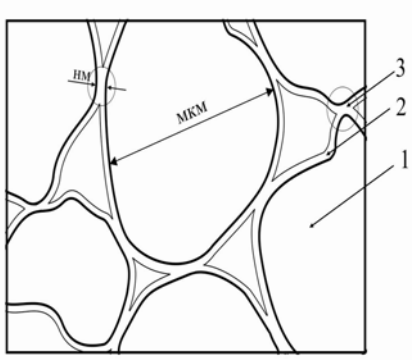


Рис. 3. Гранулы кремния (1), нанотолщинная пленка SiO_2, покрывающая микрочастицы кремниевого порошка (2), места туннельного контакта (3).

Одной из технических задач требующих своего решения для приближения возможности практического применения ПТЭ на основе гранулированного кремния является разработка технологий и конструкций этих изделий как в бескорпусном,

так и в корпусированном вариантах. Последний вариант связан с нахождением приемлемых материалов для создания корпусов преобразователей. Эти материалы должны отвечать ряду требований, а именно: материал должен быть диэлектрическим, поддаваться механической обработке на существующем стандартном оборудовании, а также выдерживать тепловые нагрузки, в том числе с градиентом температуры по поверхности изготавливаемых из него изделий. В рамках выполнения совместного международного научного проекта с коллегами из Национальной академии наук Беларуссии было предложено использовать для этих целей опыт создания магнитных материалов, изготавливаемых из наноразмерных порошков железа при сочетании методов порошковой металлургии с применением прессования и различных специальных клеевых композиций. Получаемый по данной технологии материал близок по своим механическим свойствам к некоторым маркам чугуна, но отличается малыми электро- и теплопроводностью, что позволяет надеяться на его успешное применение при изготовлении корпусов ПТЭ из гранулированного кремния, а опыт прессования порошков различных материалов будет полезен при создании бескорпусных преобразователей на указанной основе.

ЛИТЕРАТУРА

1. L.P. Bulata, L.V. Bochkova, I.A. Nefedova, R. Ahiskab, Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics № 4 (92), 48 (2014).
2. Л.П. Булат, ХТ №4, 14 (2016).
3. Г.И. Шмелев, ФТТ **1**, №4 (1959).
4. А.В. Дмитриев, И.П. Звягин, Успехи физических наук **180**, №8, 821 (2010).
5. Я.Б. Магомедов, Г.Г. Гаджиев, З.М. Омаров, Фазовые переходы, упорядоченные состояния и новые материалы, с. 1-3 (2009).
6. Б.М. Абдурахманов, Л.О. Олимов. Поликристал кремний донадорликлараро чегараларидаги физик жараёнлар. Монография (Ташкент, Мехнат, 2014).
7. J. de Boor, D.S. Kim, X. Ao, D. Hagen, A. Cojocaru, H. Foll, and V. Schmidt, EPL **96**, 16001 (2011).
8. Б.М. Абдурахманов, М.М. Адилов, М.Х. Ашуров, Х.Б. Ашуров, Б.Л. Оксенгендлер, «Разработка и исследование кремниевых изотипных, одно и многопереходных тепловольтаических преобразователей энергии» (Препринт ИЯФ АН РУз, Р-8-693, Ташкент, 2010).
9. М.С. Саидов, Б.М. Абдурахманов, Л.О. Олимов, Гелиотехника №4, 8 (2007).
10. М.С. Саидов, Гелиотехника №3, 3 (2003).
11. А.С. Саидов, А.А. Абакумов, М.С. Саидов, Ш.Н. Усмонов, К.Т. Холиков, Гелиотехника №4, 102 (2007).
12. М.Х. Ашуров, Б.М. Абдурахманов, М.М. Адилов, Х.Б. Ашуров, ДАН РУз № 3, 45 (2010).
13. Б.М. Абдурахманов, М.М. Адилов, Х.Б. Ашуров. Преобразователь энергии (Патент РУз, IAP № 04824)
14. Б.М. Абдурахманов, М.М. Адилов, Х.Б. Ашуров, З.Н. Аладьина. Преобразователь энергии (Патент РУз, IAP № 04831).
15. Б.М. Абдурахманов, М.М. Адилов, Х.Б. Ашуров. Преобразователь солнечного излучения (Патент РУз, IAP № 04884).
16. Б.М. Абдурахманов, М.М. Адилов, З.Н. Аладьина, М.Х. Ашуров, Х.Б. Ашуров. Тепловольтаический преобразователь энергии (Патент РУз, IAP № 05121).

17. Б.М. Абдурахманов, Х.Б. Ашуров, М.Ш. Курбанов. Химико-металлургический передел кремнезема в моносилановое сырье для солнечной энергетики и наноэлектроники. Монография (Ташкент, изд-во Navroz, 2018).
18. Б.Л. Оксенгендлер, Б.М. Абдурахманов, М.М. Адилов, Х.Б. Ашуров, Гелиотехника №2, 37 (2017).
19. Б.М. Абдурахманов, Т.Б. Абдурахманов, М.М. Адилов, М.Х. Ашуров, Р.Х. Ашуров, Х.Б. Ашуров, С.Е. Максимов, О.Б. Морозов, Б.Л. Оксенгендлер. Способ изготовления полупроводниковых заготовок для преобразователей энергии (Патент РУз, №1, AP 05288).
20. Б.М. Абдурахманов, М.Х.Ашуров, Х.Б. Ашуров, С.Е. Максимов, Б.Л. Оксенгендлер, З.Н. Аладьина, Ш.К. Кучканов. Термоэлектрический материал и способ его изготовления (Патент РУз, № IAP 05615).

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.310-317

АНАЛИТИЧЕСКИЙ КОНТРОЛЬ КАЧЕСТВА ОЧИСТКИ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ ИОННОМ, ИОННО-ПЛАЗМЕННОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

В.Н. Арустамов, Р.Х. Ашуров, В.М. Ротштейн, Х.Б. Ашуров, И.Х. Худайкулов

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А.Арифова АН РУз,
Дурмон йули 33, 100125, Ташкент, Узбекистан; arustamov@iplt.uz
(Получена 20.06.2019)

Вакуум-плазма усулида қоплама қоплашдан олдин наъмуна юзасини тозалаш усуллари келтирилган. Механик ва кимёвий тозалаш усуллари: иссиқлик таъсири ва милтиллама разряд ёрдамида ишлов бериш кўриб чиқилган. Наъмуналар сирт ҳолатини таҳлилий ўрганиш натижасида олинган ИК ва Раман спектрлари келтирилган. ИК ва КР спектрларининг интенсивлигини таҳлил қилиш асосида наъмуналар сиртини тозалик даражаси кўриб чиқилаётган тозалаш усулига боғлиқлигини кўрсатади.

В работе исследованы методы очистки поверхности подложек перед нанесением покрытий вакуумно-плазменными способами. Рассмотрены механический и химический способы очистки, термообработка и обработка тлеющим разрядом. Представлены ИК спектры и спектры комбинационного рассеивания (КР), полученные в результате аналитических исследований состояния поверхности образцов. На основе анализа интенсивностей ИК и КР спектров продемонстрирована зависимость степени чистоты поверхности образцов от применяемого метода очистки.

The paper presents methods of cleaning the surface of substrates before coating with vacuum-plasma methods. The mechanical and chemical cleaning methods are considered: heat treatment and glow discharge treatment. The IR and Raman spectra obtained from analytical studies of the surface state of the samples are presented. Based on the analysis of the intensities of the IR and Raman spectra, the dependence of the degree of surface purity of the samples on the cleaning method applied is demonstrated.

I. ВВЕДЕНИЕ

Как известно, вакуумно-плазменные технологии применяются для нанесения тонких функциональных покрытий на различные материалы (металлы, стекла, полимеры и др.). При этом свойства наносимых покрытий определяются как параметрами нанесения, так и состоянием поверхности подложки [1-4].

Наиболее важным параметром любого покрытия является его адгезия. Следует отметить, что при величине адгезии не выше 0.4 эВ на один атом, у осажденных атомов не происходит разрушения электронных оболочек и коллективизации электронов, а силы удержания атомов на поверхности типичны для сил Ван-дер-Ваальса, что характерно для случая физической сорбции. При значительных энергиях имеет место перераспределение электронов, что характерно для хемосорбции. Кроме того, возможен вид взаимодействия между инородными атомами с образованием новой фазы.

Результаты комплексных экспериментов по исследованию адгезии покрытий показали, что величина адгезии в значительной степени зависит от материалов

покрытия и подложки, при этом наибольшая адгезия имеет место в случае одноименных материалов и материалов, активных к кислороду.

Следует также учитывать топографию поверхности изделия, так как различные заусенцы, трещины и т.п. играют сугубо отрицательную роль при формировании будущих покрытий. В то же время степень шероховатости поверхности в определенных пределах, соответствующих технологическим требованиям, предъявляемым к процессу нанесения покрытий, увеличивает площадь фактического сцепления, что приводит к увеличению адгезии.

Решающим фактором для формирования покрытий с требуемыми свойствами и высокой адгезией является химическая чистота поверхности подложки (в идеале атомарно чистой), фактически определяющая уровень взаимодействия наносимого покрытия и материала изделия. Любые загрязнения поверхности изделия снижают уровень формируемой молекулярной адгезии и как следствие приводят к растрескиванию и отслаиванию наносимых покрытий на этих участках.

Таким образом, состояние поверхности изделия перед нанесением покрытия является основным фактором, определяющим качество, в том числе адгезию, наносимого покрытия и его работоспособность.

II. ПРЕДВАРИТЕЛЬНАЯ ПОДГОТОВКА ОБРАЗЦОВ

Выбор конкретного метода очистки поверхности изделия определяется с учетом свойств и характера загрязнений. На изделиях, как правило, остаются следы предыдущей обработки, в том числе различные масла, кислоты, щелочи, а также ворс, пыль и т.п. Правильное определение характера загрязнений способствует получению требуемых технических и эксплуатационных характеристик наносимых покрытий.

В процессе обработки металлических деталей используются различные смазочные материалы. Разнообразие используемых смазок вызвано наличием различных технологических процессов, используемых при обработке металлических деталей. В каждом конкретном случае для достижения оптимальных результатов используются вполне определенные смазочные материалы. Наиболее часто в качестве смазочных материалов при обработке металлов используются рецептуры из целого ряда органических и неорганических соединений. В основном они представлены жидкостями на основе воды и минеральных масел.

Как правило, поверхность металлических изделий после их изготовления покрыта жировыми загрязнениями и оксидной пленкой. Использование химической и электрохимической обработок позволяет значительно снизить степень загрязнения поверхности изделий. Обезжиривание проводят в щелочных растворах или органических растворителях для удаления жиров как животного, так и растительного происхождения, а также различных минеральных масел. Щелочи способствуют разложению жиров с образованием растворимых в воде солей жирных кислот и глицерин.

Следует отметить, что минеральные масла химически не разлагаются щелочами, но под действием сил поверхностного натяжения происходит разрушение пленки масла и образование капелек. В этом случае наличие в растворе поверхностно-активных веществ с моющими н эмульгирующими свойствами необходимо для полного освобождения поверхности металла от масла. Кроме того,

движение жидкости за счет нагрева или перемешивания раствора также способствует протеканию данного процесса.

Электрохимическое обезжиривание производится на катоде или аноде в растворах щелочей. При этом используемый состав подобен тому, что и при химическом обезжиривании. Эффективность электрохимического обезжиривания значительно выше химического обезжиривания.

Одним из этапов процедуры очистки поверхности изделия является ультразвуковая очистка. Ультразвуковой метод очистки обеспечивает быструю и качественную очистку изделий любой, в том числе сложной, конфигурации, а также позволяет удалить загрязнения, порой не поддающиеся удалению другими методами. При этом используются не токсичные органические растворители, а значительно более дешевые щелочные растворы. Кроме того, данный метод позволяет механизировать трудоемкие операции очистки.

III. ОЧИСТКА ПОВЕРХНОСТИ ОБРАЗЦОВ ТЛЕЮЩИМ РАЗРЯДОМ

Для обработки поверхности подложки непосредственно перед осаждением покрытия применяют электрофизический метод, а именно: очистку поверхности в тлеющем разряде в вакуумных условиях. В ходе технологического процесса очистки поверхности ионами тлеющего разряда в вакуумированную камеру, в которую предварительно помещены предназначенные к очистке изделия, напускается рабочий газ, как правило, аргон, в атмосфере которого формируется тлеющий разряд с параметрами, обеспечивающими необходимый режим очистки обрабатываемой поверхности. Характерный набор параметров может быть представлен давлением в камере 10^{-1}–10^{-2} Па, плотностью тока ионов до 8 мА/см^2 и напряжением на электродной системе 400–900 В. Такой режим обеспечивает удаление как хемосорбированной воды, так и тонких поверхностных загрязнений без нагрева глубинных слоев изделий.

Очистка изделий в плазме тлеющего разряда, после описанных выше процессов очистки, позволяет получить адгезию покрытий, сравнимую с когезионной прочностью подложек. При этом отпадает необходимость в предварительном нагреве изделий. Эффект очистки можно объяснить созданием на поверхности изделий активных центров адсорбции и адгезии, а также инициированием химического взаимодействия между материалом пленки и изделием.

Таким образом, плазменная обработка поверхности подложек перед нанесением покрытий в вакууме ведет не только к удалению поверхностных загрязнений, но и к модификации свойств поверхности, повышая ее адсорбционную и адгезионную активности, т.е. к созданию на поверхности изделий активных центров адсорбции и адгезии распыленных частиц, а также к упрочнению поверхности. При очистке поверхности в тлеющем разряде ее активность по отношению к парам металла может сохраняться и после разгерметизации камеры. Перед металлизацией такие изделия можно хранить на воздухе некоторое время. При повторной откачке камеры и напылении без очистки адгезия полученных покрытий достаточно высока. Это имеет существенное значение в технологическом процессе, так как позволяет, при необходимости, проводить подготовку поверхности изделий в одной камере, а последующее нанесение покрытия в другой.

При подготовке изделий к нанесению покрытий должны учитываться как свойства материала изделия, так и параметры нанесения покрытия, такие как

давление, мощность разряда, материал распыляемой мишени. Только правильная подготовка поверхности изделия обеспечивает получение качественных покрытий.

IV. РЕЗУЛЬТАТЫ АНАЛИТИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ И ОБСУЖДЕНИЕ

Контроль состояния поверхности образцов после проведения соответствующей механической обработки осуществляли с помощью как оптических приборов типа микроскопа МИИ-4, так и с помощью сканирующего зондового микроскопа SOLVER NEXT (NT-MDT), позволяющего оценить степень шероховатости поверхности образца.

В качестве примера на рис. 1 представлены данные нанопрофилометрии по морфологии участка поверхности изделия.

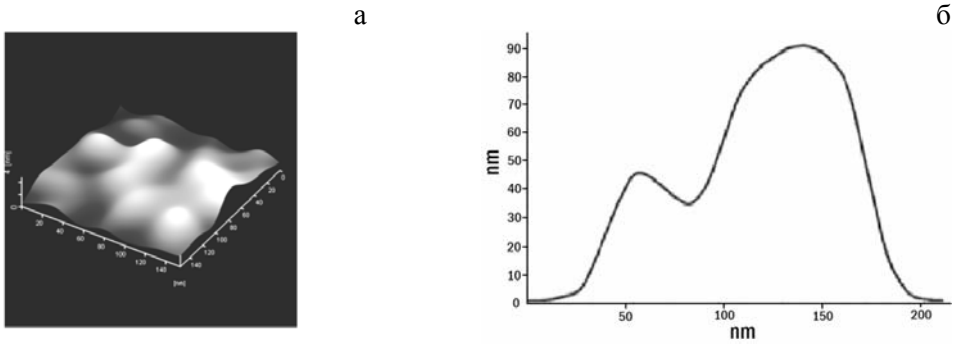


Рис. 1. Нанопрофилометрия участка поверхности образца (а) и профиль поверхности участка образца вдоль поперечного сечения (б).

Полученные с использованием атомно-силовой микроскопии данные позволяют определить изменение высоты рельефа исследуемого участка поверхности изделия и соответственно степень шероховатости его поверхности. Как видно из рисунка, для данного участка исследуемой поверхности максимальное изменение высоты рельефа поверхности составляет порядка 90 нм. Степень загрязнения поверхности образцов, в т.ч. наличие на поверхности различных окислов, масел и т.п., оценивали с использованием Фурье-спектрометра (Agilent Technologies Cary 640 Series FTIR Spectrometer), позволяющего проводить идентификацию неизвестных материалов, определять функциональные группы в органических и неорганических веществах, количественно определять компоненты в различных смесях. ИК Фурье-спектрометр предназначен для измерения оптических спектров органических и неорганических веществ по шкале волновых чисел в инфракрасном (ИК) диапазоне, а также для количественного анализа и контроля качества продукции в химической, нефтехимической, фармацевтической, пищевой и парфюмерной промышленностях, осуществления экологического контроля, криминалистической и других видов экспертиз.

Интерпретацию инфракрасных спектров проводили с использованием понятия характеристических частот. В отличие от простейших двухатомных молекул, в многоатомных молекулах колебания не относятся лишь к одной связи или группе атомов, напротив, все атомы молекулы находятся в движении, хотя бы и небольшом. Однако было экспериментально установлено, что присутствие в

молекуле определённых функциональных групп приводит к возникновению поглощения излучения характеристической частоты. Влияние остальной части молекулы при этом обычно не превышает 5%. Это наблюдение даёт возможность с высокой долей вероятности отнести ту или иную полосу поглощения к конкретной функциональной группе, присутствующей в молекуле.

Для получения объективной информации об эффективности используемых видов очистки состояние поверхности изделий анализировали с помощью ИК Фурье-спектрометра до и после каждого технологического цикла: до проведения процедур очистки; после всех указанных процедур очистки, за исключением очистки тлеющим разрядом, и после проведения очистки поверхности изделий тлеющим разрядом.

На рис. 2-4 представлены ИК-спектры поверхности изделия, полученные соответственно для указанных выше условий. Как видно из анализа полученных спектров, на поверхности изделия присутствует целый ряд различных загрязнений.

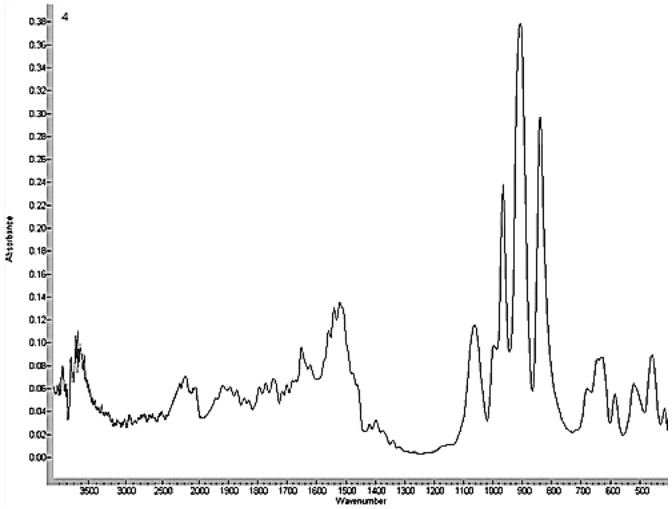


Рис. 2. ИК-спектр поверхности изделия, полученный до проведения процедур очистки.

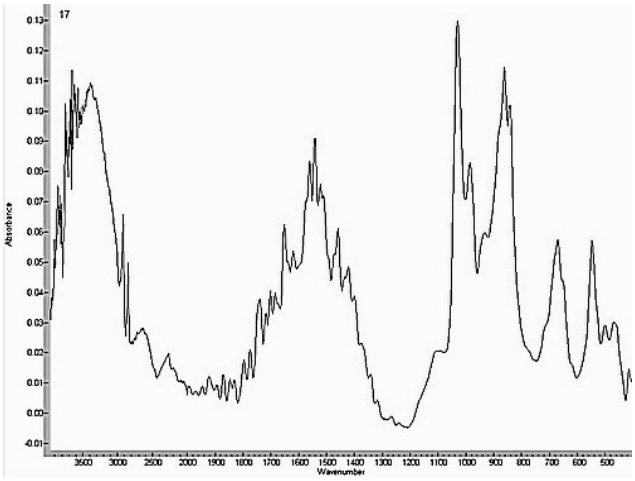


Рис. 3. ИК-спектр поверхности изделия, полученный после проведения всех процедур очистки, за исключением очистки тлеющим разрядом.

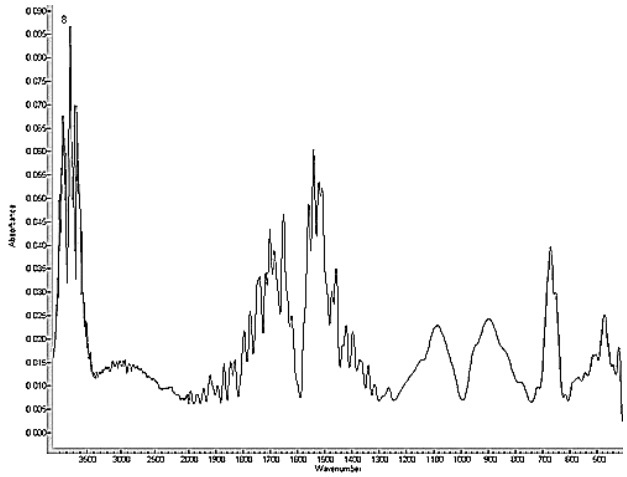


Рис. 4. ИК-спектр поверхности изделия, полученный после проведения процедуры очистки тлеющим разрядом.

Согласно литературным данным [5-8], можно предположить, что полосы поглощения в области 3400 $см^{-1}$, 1400 $см^{-1}$ и 400–600 $см^{-1}$ характерны для Fe_2O_3, полосы поглощения в области 3200 $см^{-1}$, 2900 $см^{-1}$ и 1300–1500 $см^{-1}$ характерны для масел минеральных, полосы поглощения в области 1600 $см^{-1}$ характерны для ароматических углеводородов, полосы поглощения в области 1500 $см^{-1}$ характерны для вызелина, а полосы поглощения в области 800–1000 $см^{-1}$ для парафина.

Анализ интенсивности соответствующих пиков приведённых выше ИК спектров позволяет оценить эффективность каждого этапа очистки поверхности изделия.

Следует отметить, что степень очистки различных видов загрязнений различна. Так, если степень очистки загрязнений, соответствующих частотам поглощения в области 1300–1500 $см^{-1}$, увеличилась в два раза, то степень очистки загрязнений, соответствующих частотам поглощения в области 800–1000 $см^{-1}$, увеличилась в девятнадцать раз.

Состояние поверхности изделий анализировали также с помощью Раман-спектрометра (InVia Raman Spectrometer) производства компании «Renishaw», Великобритания, обеспечивающего проведение как фундаментальных исследований, так и структурных исследований рутинного характера, в том числе обнаружение, идентификацию, качественный и количественный анализ различных органических и неорганических веществ. Аналогично исследованиям, проведенным с помощью ИК Фурье-спектрометра, для получения объективной информации об эффективности используемых видов очистки состояние поверхности изделий анализировали на Раман-спектрометре также с учетом проводимых технологических циклов очистки: после всех указанных процедур очистки, за исключением очистки тлеющим разрядом и после проведения очистки поверхности изделий тлеющим разрядом.

На рис. 5 и 6 представлены спектры комбинационного рассеяния (КР) поверхности изделия, полученные соответственно для указанных выше условий. Как и в случае исследований на Фурье-спектрометре, анализ полученных КР спектров указывает на наличие на поверхности изделия целого ряда различных загрязнений.

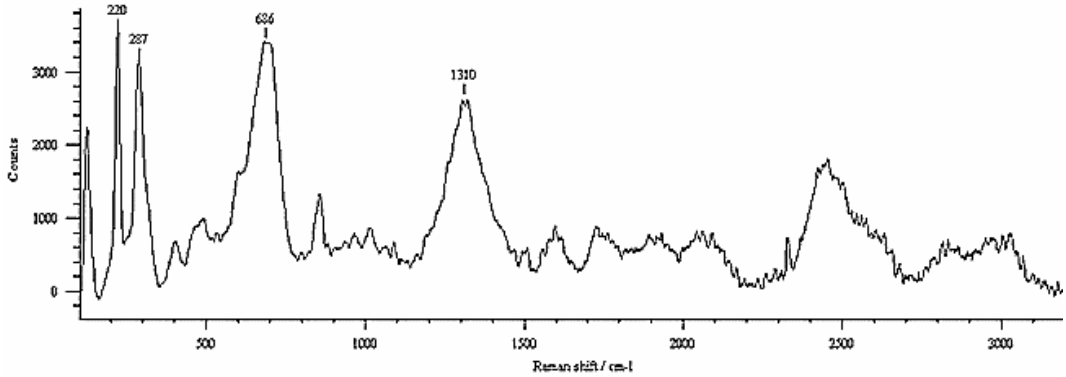


Рис. 5. Спектр комбинационного рассеяния (КР) поверхности изделия, полученный после всех указанных процедур очистки, за исключением очистки тлеющим разрядом.

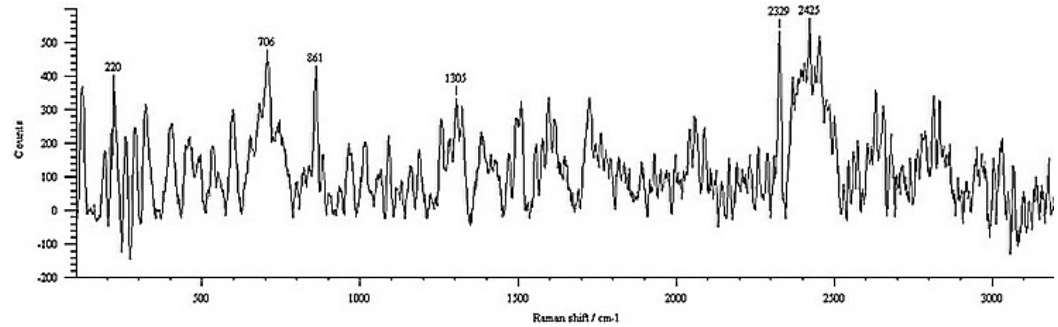


Рис. 6. Спектр комбинационного рассеяния (КР) поверхности изделия, полученный после проведения очистки поверхности изделия тлеющим разрядом.

Согласно литературным данным [9-13], можно предположить, что в КР спектрах частоты в области 1300 $см^{-1}$, 600 $см^{-1}$, 400 $см^{-1}$, 300 $см^{-1}$, 200 $см^{-1}$ характерны для Fe_2O_3, а частоты в области 1650 $см^{-1}$, 1450 $см^{-1}$, 1300 $см^{-1}$, 1000 $см^{-1}$ и 8200 $см^{-1}$ характерны для масел минеральных.

Анализ интенсивности соответствующих пиков, приведённых выше КР спектров позволяет оценить эффективность каждого этапа очистки поверхности изделия.

Как и в случае ИК спектров, сравнение КР спектров приводит к выводу о различной степени очистки присутствующих видов загрязнений. Так, если степень очистки от загрязнений, соответствующих частотам в области 200–300 $см^{-1}$, увеличилась в 10–12 раз, то степень очистки от загрязнений, соответствующих частотам в области 2500 $см^{-1}$, увеличилась в три раза.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.И. Кострижицкий В.Ф. Карпов, М.П. Кабаниченко и др. Справочник оператора установок по нанесению покрытий в вакууме (Москва, Машиностроение, 1991).
2. К. Оура, В.Г. Лифшиц, А.А. Саранин, А.В. Зотов, М. Катаяма: Введение в физику поверхности. (Ин-т автоматики и процессов упр. ДВО РАН) (Москва, Наука, 2006).
3. Р.Т. Галяутдинов, М.В. Елхин, Н.Ф. Кашапов, Вестник КГТУ (Казань), № 2, 335 (2010).

4. И.Ш. Абдуллин, А.А. Хубатхузин, Вестник КГТУ (Казань) № 11, 625 (2010).
5. Ш.Н. Алиева, А.М. Керимова, Р.Б. Абдуллаев, Т.Р. Мехтиев, Физика твердого тела **59**, вып. 3, 528 (2017).
6. F.Sh. Tehrani, V. Daadmehr, A.T. Rezakhani, R.H. Akbarnejad, S. Gholipour, J. Supercond. Novel Magnetism **25**, 2443 (2012).
7. A. Hannisdal, P.V. Hemmingsen, and J. Sjoblom, J. Industrial and Engineering Chemistry Research **44**(5), 1349 (2005).
8. R. M. Roehner, and F.V. Hanson, J. Energy and Fuels **15,** 756 (2001).
9. R. Korifi, Y. Le Dreau, J. Molinet, J. Artand, N. Dupuy, J. Raman Spec. **42**, 1540 (2011).
10. M.Q. Zou, X.F. Zhang, X.H. Qi, H.L. Ma, Y. Dong, C.W. Liu, X. Guo, H. Wang, J. Agric. Food Chem. **67**, 6001 (2009).
11. F.U. Farhad, K.M. Abedin, R. Islam, A.I. Talukder, A.F.M.Y. Haider, J. Appl. Sci. **9**, 1538 (2009).
12. С.М. Вовк, А.Н. Толстых, Л.М. Шарыгин, В.И. Денисов, В.Б. Подоведов, Атомная энергетика **69**, вып. 3, 185 (1990).
13. В.А. Викулов, В.В. Балашев, Т.А. Писаренко, А.А. Дмитриев, В.В. Коробцов, Письма в ЖТФ **38**, вып. 3, 87 (2012).

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.318-324

ПРИМЕНЕНИЕ ТРЕКОВЫХ ДЕТЕКТОРОВ CR-39 ДЛЯ ИЗМЕРЕНИЯ ОБЪЕМНОЙ АКТИВНОСТИ И СКОРОСТИ ЭКСХАЛЯЦИИ РАДОНА-222 В ДОМАХ ТАШКЕНТА

А. Васидов, С.О. Васидова

Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент, Узбекистан
(Получена 23.01.2019)

Мақоланинг асосий мақсади CR-39 изли детекторларидан фойдаланиб янги икки ва уч қаватли уйлардаги Rn-222 активлигини қиш ва ёз фаслида ўлчаш, яшовчиларнинг радон туфайли оладиган йиллик эффектив дозасини ҳисоблаш, уйларнинг тупроғи, қурилиш материаллари ва девор юзаларидан чиқаётган радон тезлигини аниқлашдир. Ўлчов натижаларига кўра, баъзи уйлардаги радон ҳажмий активлиги ва йиллик эффектив дозалари назорат меёр қийматидан катталиги қайд қилинди. Тупроқ қурилиш материаллари ва уй деворлари юзасидан чиқаётган радон тезлигининг қийматлари назорат меёридан камлиги аниқланди.

Целью данной работы является измерение объемной активности радона трековыми детекторами типа CR-39 в новых двух и трехэтажных домах Ташкента в зимнее и летнее время, оценка ежегодной эффективной дозы, получаемой жителями дома от радона и его дочерних продуктов распада, определение скорости эксхаляции радона с поверхности почв, строительных материалов и стен домов. Полученные результаты показали, что среднее значение объемной активности радона и соответствующая ежегодная эффективная доза в некоторых исследованных домах превышает предельно допустимую концентрацию и дозу. Значения скорости эксхаляции радона с поверхности почв, строительных материалов и стен домов находятся значительно ниже установленной нормы по радиационной безопасности.

The main aim of this work is to carry out measurements of radon and its daughter product's activity in newly-built two- and three-storeyed houses in winter and summer seasons, an assessment of annual effective doses received with residents and determination of radon exhalation rates from soils, building materials and walls of houses. The measurements are carried out with using CR-39 detectors. The results of measurements are shown, that the mean values of indoor radon activities and annual effective doses in houses were more than permissible limit. The values of radon exhalation rate from soils, building materials and walls have low values then radiation safety standard.

I. ВВЕДЕНИЕ

Ранее были проведены сезонные измерения объемной активности радона-222 (ОАР) в одноэтажных и многоэтажных домах Ташкента с использованием ядерных твердотельных трековых детекторов (ЯТТД) типа CR-39 [1]. Многие дома были построены из необожженного кирпича или каркасным способом, где пустоты между деревянными каркасами заполнены глиной. В работе [2] также были определены значения скорости эксхаляции радона-222 (СЭР) с поверхности строительных материалов и стен комнат. Полученные результаты показали, что значения ОАР и СЭР намного больше в домах, построенных из необожженного кирпича и каркасным способом, чем в домах, построенных из бетона и обожженного кирпича [1, 2].

В последние годы прослеживается рост частного сектора в Ташкенте, большинство частных домов составляют двух- и трехэтажные особняки с

помещениями для сауны или спортивных занятий. Согласно требованиям НРБ-2006 РУз [3], предельно допустимая концентрация радона-222 (или ОАР) в помещениях не должна превышать 200 Бк/м^3, а ежегодная эффективная доза ≤5 мЗв/год, скорость эксхаляции радона-222 с поверхности земли не должна превышать 288 Бк/м^{2}ч. Как известно, более 50% ежегодной радиоактивной дозы, получаемой людьми, приходится на долю радона-222 и его дочерних продуктов распада (ДПР). Количественное увеличение частных домов и применение различных природных материалов в домостроительстве, требует сохранения и обеспечения радоновой безопасности в новых частных домах Ташкента.

Основной целью данной работы является: измерение объемной активности радона в новых домах в зимнее и летнее время года, оценка ежегодной эффективной дозы, получаемой жителями дома от радона и его дочерних продуктов распада, определение скорости эксхаляции радона с поверхности земли, строительных материалов и стен домов.

II. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Методы измерения с помощью ядерных твердотельных трековых детекторов типа CR-39.

Измерения проводили с использованием метода пассивного детектирования наиболее практичным детектором CR-39, отличающегося от других ЯТТД по чувствительности и эффективности регистрации [4]. Прозрачные CR-39 детекторы толщиной 0.70 мм и площадью 25×25 мм^2 с серийными номерами, выгравированными в правом нижнем углу для облегчения идентификации, были установлены внутри цилиндрических пластиковых камер. На рис. 1 приведены схематические изображения экспозиционных камер для измерения ОАР в воздухе помещений с объемом V_1=148 см^3 (∅=5.2см и h=7см) и с V_2=310 см^3 (∅=5.5 см, h=15см) для измерения СЭР.

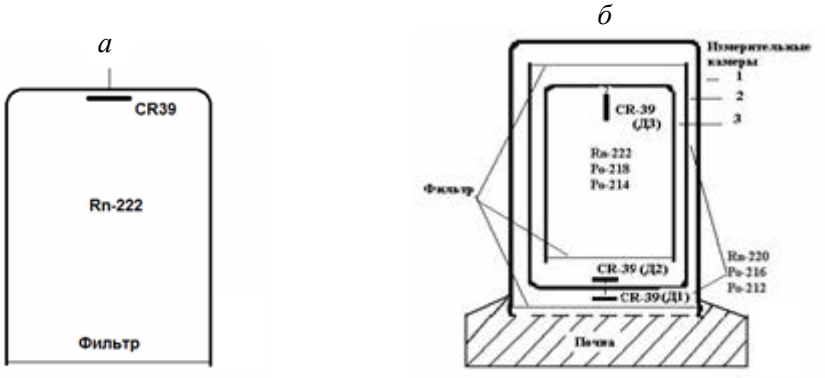


Рис. 1. Схематические виды экспозиционных камер для измерения ОАР (а). и СЭР (б).

Камеры для ОАР были установлены на расстоянии 200 см от пола и 50–60 см от поверхности стен и потолка для регистрации только Rn-222. В камере *б* был использован трехкамерный регистратор радона, который представляет собой три вставленные друг в друга пластиковые камеры с детекторами CR-39 [5]. Входные плоскости камер были закрыты бумажными фильтрами для ограничения входа ДПР и аэрозолей и установлены в противоположных направлениях для увеличения

расстояния и создания искусственных барьеров на пути ^{220}Rn. Камеры плотно крепили на поверхности почв и/или исследуемого материала и/или стен, внешний круг камер герметично изолировали слоем пластилина или мягко прессовали, заполнив внешний круг гранулами в случае сыпучего материала.

После окончания экспозиции детекторы были удалены из камер для химического травления в растворе 6M NaOH при 70°C в течение 8–10 часов. После травления детекторы промывали в водопроводной воде в течение 20–25 мин и в дистиллированной воде 5–7 мин, а затем мокрые детекторы сушили горячим воздухом. Плотность треков α-частиц из CR-39 детектора подсчитывали на оптической установке, состоящей из оптического микроскопа и телекамеры, встроенных в компьютер. Плотность фона CR-39 детекторов находится в пределах 4.0–6.0 тр/см^2, что учтено при обработке результатов. Средние квадратичные ошибки метода составили ~20 и ~25% для ОАР и СЭР соответственно. При этом ошибки состояли из следующих вкладов: калибровочного коэффициента (КК) ≤15%, подсчета числа α-треков ≤12% и величины обратной диффузии радона ≤12% [5, 6].

Формулы для определения и оценки объемной активности, ежегодной эффективной дозы и скорости эксхаляции радона-222.

Значения КК для CR-39 камер (V_1) и (V_2) были определены заранее и равны 8.7×10^{-3} и 6.7×10^{-3} (тр/см^{2}ч)/(Бк/м^3) для ОАР и СЭР [4, 5] соответственно.

Значения ОАР были найдены из следующего соотношения [4]:

$$A = \rho/tКК, \quad (1)$$

А – значение ОАР, Бк/м^3, ρ – удельная плотность α-треков на единицу площади, тр/см^2, t – время экспозиции, ч, КК – калибровочный коэффициент, тр/см^{2}ч/Бк/м^3.

Ежегодные эффективные дозы (ЕЭД), получаемые жителями домов, были найдены из следующей формулы [1, 7]:

$$ЕЭД = A_{ср}\cdot FTD, \quad (2)$$

где ЕЭД, мЗв/год; $A_{ср}$ – средние значения ОАР, Бк/м^3; F – коэффициент равновесия, F = 0.5; T – время, проводимое в помещениях и подвале (сауне) в течение года, 6000 и 600 ч/год соответственно; D – коэффициент преобразования в дозы, $D = 9\times10^{-6}$ мЗв/ч на 1 Бк/м^3 [7].

В [8] было введено понятие сезонного коэффициента СК для оценки и сравнения ОАР в зимнее и летнее время года, который определяется из соотношения:

$$СК = A/A_{ср}, \quad (3)$$

$$A_{ср} = (A_1 + A_2 + \ A_n)n^{-1}, \quad (4)$$

A_1, A_2, A_n – значения ОАР для сезона, Бк/м^3; n – количество измерений.

Значения СЭР определяли по формуле, предложенной в [6]:

$$E = A\cdot\lambda(V/S)\cdot K(t), \quad (5)$$

где E – значение СЭР, Бк/м^{2}h; А – значение ОАР, Бк/м^3; λ – постоянная распада, час$^{-1}$; V – объем камеры, м^3; S – входная площадь камеры, м^2; $K(t)$ – эффективное время, определяемое по формуле:

$$K(t) = t/[t–(1–e–\lambda t)/\lambda], \quad (6)$$

где t – время экспозиции, час.

III. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Результаты измерений объемной активности радона и ежегодных эффективных доз.

В табл. 1 приведены значения ОАР и ЕЭД, измеренные в зимний ($А_{зима}$) и летний ($А_{лето}$) сезоны года CR-39 детекторами в различных помещениях домов. При определении вариаций сезонного коэффициента (СК) и оценке ЕЭД были использованы средние значения ОАР.

Таблица 1. Значения ОАР (объемной активности радона) и ЕЭД (ежегодных эффективных доз) в новых домах Ташкента.

№	Тип комнат	$А_{зима}$, Бк/м^3	$А_{лето}$, Бк/м^3	$А_{ср}$, Бк/м^3	ЕЭД, мЗв/год
I.	зал	195.4	125.2	160.3	4.32
	кухня	294.3	270.5	282.4	7.62
	спальня	125.5	147.3	136.4	3.68
	подвал	294.3	270.0	282.2	0.76
II.	зал	85.0	92.6	88.2	2.38
	кухня	250.0	332.3	291.2	7.86
	спальня	71.0	53.1	62.1	1.67
	подвал	72.3	61.7	67.0	0.18
	сауна	535.2	356.8	446.0	1.20
III.	зал	72.1	133.5	102.8	2.77
	кухня	120.5	112.3	116.4	3.14
	спальня	91.8	79.4	85.6	2.31
	подвал	94.2	93.2	93.7	0.25
IV.	зал	95.3	110.3	102.8	2.77
	кухня	81.9	121.7	101.8	2.74
	спальня	80.7	102.7	91.7	2.47
	подвал	76.3	135.5	105.9	0.28
V.	зал	284.4	309.1	296.7	8.00
	кухня	242.4	223.5	233.0	6.29
	спальня	455.4	368.1	411.7	11.12
	подвал	923.3	953.1	938.2	2.53
VI.	зал	191.8	189.6	190.7	5.14
	кухня	370.7	250.9	310.8	8.40
	спальня	177.4	176.2	176.8	4.77
	подвал	245.5	261.3	253.4	0.68
VII.	зал	196.3	201.7	199.0	5.37
	кухня	446.8	225.1	336.0	9.10
	спальня	314.4	323.1	318.7	8.60
VIII.	зал	81.1	78.4	79.7	2.15
	кухня	198.6	160.2	179.4	4.84
	спальня	172.7	112.3	142.5	3.84
IX.	зал	130.4	155.2	142.8	3.85
	кухня	112.1	61.8	87.0	2.34
	спальня	156.7	128.7	142.7	3.85

Из табл. 1 видно, что среднее значение ОАР больше в домах, где имеются подвалы, и находится в пределах от 62 до 411 Бк/м^3. Фундаменты подвалов в домах II (67.0 Бк/м^3), III (93.7 Бк/м^3) и IV (105.9 Бк/м^3) имели хорошую изоляцию и сквозные окна для вентиляции. Средние значения ОАР в подвальных помещениях составили 282.2 Бк/м^3, 938.2 Бк/м^3 и 253 Бк/м^3 для домов I, V и VI соответственно. Из-за плохой вентиляции в сауне дома II величина ОАР составила соответственно летом и зимой 356.8 и 535.2 Бк/м^3. В двухэтажных домах VII-IX (без подвалов) средние значения ОАР варьировалась от 79.7 до 336 Бк/м^3. Значения ОАР в кухнях больше на 20%, чем значения ОАР в зале и спальне, эта разница объясняется вкладом радонового газа из воды и метанового газа. На рис. 2 показаны плотности α-треков в сауне и спальне после экспозиции CR-39 детекторов.

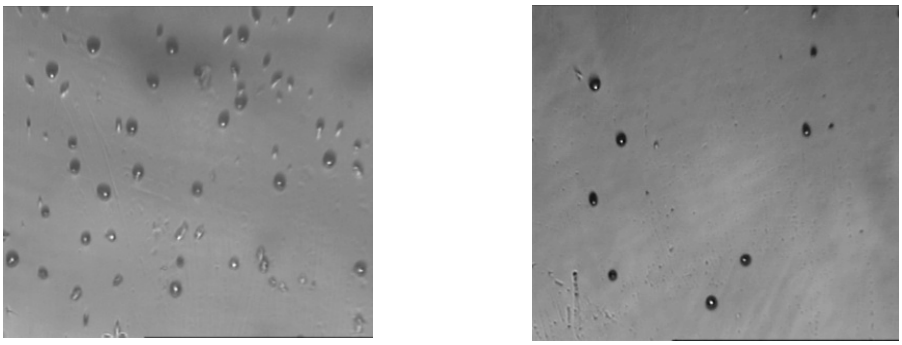


Рис. 2. Числа α-треков в сауне (слева) и в спальне (справа) после экспозиции CR-39 детекторов.

Средние значения ОАР для всех домов составили 215.0 и 196.6 Бк/м^3 в зимнее и летнее время года соответственно. На рис. 3 представлена диаграмма вариации сезонных коэффициентов для гостиной, кухни и спальни.

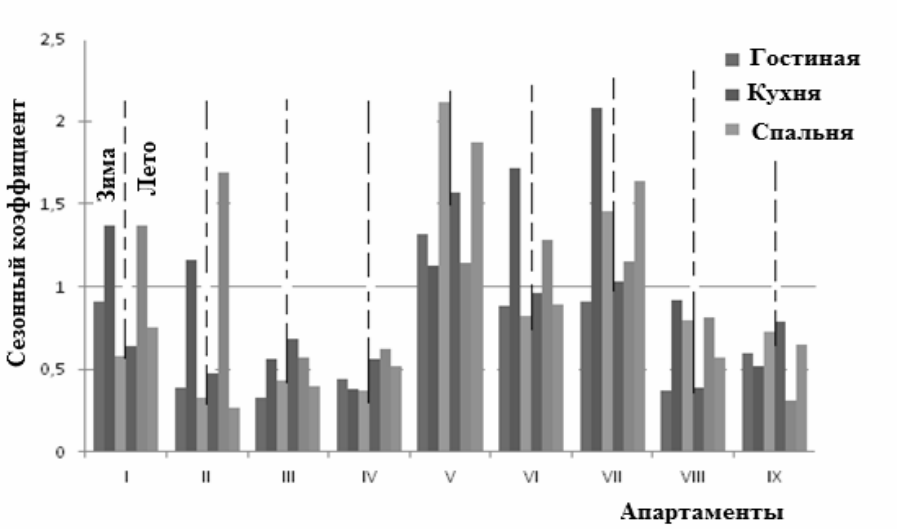


Рис. 3. Диаграмма вариации сезонных коэффициентов в домах зимой и летом.

Как видно, разница ОАР в сезонных значениях в основном незначительна и составляет 4–5%. Однако самый высокий СК 1.7–2 был найден для гостиной и спальни I и V домов летом, что на 20% выше, чем общий СК. Значения ЕЭД, получаемые жильцами домов варьировались в диапазоне от 1.67 до 11.12 мЗв/год. Дома с подвалами давали больше ЕЭД (до 11.12 мЗв/год), чем дома без подвалов (9.10 мЗв/год). Особенно в кухонных комнатах значения ЕЭД превышали в 2–5 раз допустимую дозу.

Скорость эксхаляции радона с поверхности почв, стройматериалов и стен.

Почва, строительные материалы и стены домов содержат некоторые концентрации ^{238}U и ^{226}Ra, которые являются потенциальными излучателями радона-222. Значения СЭР мы определяли из почв (под домами), песка, глин, цемента, алебастра, бетона, стен из обожженного кирпича (ОЖК), оштукатуренной стены (ШТК), кафельной стены (КФ), стен, покрытых масляной краской (МК) и моющимися обоями (МОБ). В табл. 2 приведены экспериментальные значения СЭР с поверхности исследованных материалов.

Таблица 2. Величины СЭР с поверхности почв, строительных материалов и стен

№	Материалы	Плотность, тр/см^2·дн	ОАР, Бк/м^3	СЭР, Бк/м^2·ч
1.	Почва	200–520	1490–3440	11.2–26.0
2.	Песок	36–46	223.2–285.2	0.280–0.369
3.	Глина	44–61	272.2–378.2	0.342–0.476
4.	Цемент	8–11	49.6–68.2	0.062–0.085
5.	Алебастер	7–9	43.4–55.8	0.054–0.073
6.	Бетон	48–57	297.6–353.4	0.374–0.445
7.	ОЖК	20–32	121.0–195.3	0.151–0.246
8.	ОЖК+ШТК	29–31	179.8–192.2	0.226–0.241
9.	ОЖК+ШТК+КФ	9–12	55.8–74.4	0.073–0.10
10.	ОЖК+ШТК+МК	19–22	117.8–136.4	0.148–0.172
11.	ОЖК+ШТК+МОБ	10–13	62.0–80.6	0.078–0.101
12.	Потолок	28–32	173.6-186.0	0.218–0.234

Как показано в табл. 2, самое высокое значение СЭР для почв достигает 26 Бк/м^{2}ч, затем идет бетон 0.44 Бк/м^{2}ч, а среди зернистых материалов песок и глина имеют СЭР 0.37 и 0.48 Бк/м^{2}ч. СЭР из цемента и алебастра составляет 0.085 и 0.073 Бк/м^{2}ч. Таким образом, СЭР из почвы соответственно в 59.0, 70.3, 54.2, 306 и 356 раз больше, чем СЭР из бетона, песка, глины, цемента и алебастра. Разница в СЭР из стен из обожженного кирпича (0.15–0.25 Бк/м^{2}ч) и после ее штукатурки (0.23–0.24 Бк/м^{2}ч) незначительна. При покрытии поверхности стен кафелем, масляной краской и моющимися обоями отмечалось снижение значений СЭР на 25–30% и 50–60%. Значения СЭР для потолков домов – 0.218–0.234 Бк/м^{2}ч.

IV. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Применение CR-39 детекторов при сезонных измерениях ОАР в домах Ташкента, а также при определении СЭР с поверхности почв, строительных материалов и стен домов показали высокую эффективность детектора CR-39 в

подобных измерениях. Сезонная разница в значениях ОАР незначительна и составляет всего 4–5%. Однако величины ОАР и ЕЭД в некоторых комнатах домов превышают значения предельно допустимой дозы в 2 и 3 раза. Как следует из экспериментов по определению СЭР, основным источником повышения уровня радона в домах является почва, где расположен дом. Характерной чертой результатов измерения является тот факт, что каждая комната дома имеет специфичную концентрацию радона.

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Васидов, З. Ен, Т.С. Тиллаев, Экологические системы и приборы № 4, 35 (2006).
2. А. Васидов, Т.С. Тиллаев, Экологические системы и приборы № 12, 40 (2010).
3. СанПиГН РУз, №0193 (2006).
4. А. Васидов, С.М. Замятин, Узбек. физич. журн. **6**, 206 (2004).
5. A. Vasidov, J. Rad. Nucl Chem. **302**, 919 (2014).
6. M.I. Al-Jarallah, Fazal-ur-Rahman, Radiat. Meas. **34**, 491 (2001).
7. N. Sharma, H.S. Virk, Radiat. Meas. **34**, 505 (2001).
8. Said Rahman. Measurement of Seasonal and Spatial Variation of Indoor Rn and Development of a Passive Dosimeter for Tn (Pakistan, PIEAS, 2008).

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.325-328

ПИСЬМА В РЕДАКЦИЮ

ВЛИЯНИЕ ПЛОТНОСТИ ТОКА НА ВЫХОД МНОГОАТОМНЫХ НАНОЧАСТИЦ ПРИ РАСПЫЛЕНИИ МЕТАЛЛОВ ИОНАМИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ

Р. Курбанов[1], З.А. Исаханов[2], И.О. Косимов[3], А.С. Халматов[2]

[1]Ташкентский архитектурно-строительный институт, Ташкент, Узбекистан
[2]Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан
za.isakhanov@gmail.com
[3]Ташкентский государственный технический университет, Университетская 2, Узбекистан
(Получена 13.06.2019)

Металл сиртини тезлаштирилган ионлар билан чанглантирилганда, M_1^+ атомларнинг, ҳамда кўп атомли M_n^+ нанозаррачаларнинг чиқиши сиртга тушаётган ионлар ток зичлигига боғлиқлиги ўрганилган.

Исследованы выход атомов M_1^+, а также многоатомных наночастиц типа M_n^+ в зависимости от плотности тока распыленных ускоренных ионов поверхностью металлов.

The yield of M_1^+ atoms and M_n^+ type nanoparticles as a function of current density during the sputtering of the surface of metals by accelerated ions was investigated.

Введение. Распыление твердых тел при бомбардировке ускоренными ионами используется для решения ряда практических задач, в частности, для целенаправленного изменения поверхностных и объёмных свойств твердого тела, для анализа веществ на атомно-молекулярном уровне, а также для решения проблем, связанных с созданием и эксплуатацией термоядерных реакторов.

Образованные при ионной бомбардировке на поверхности металлов заряженные наночастицы типа M_n^+ (M – символ химического элемента, $n \leq 10$ – количество атомов в наночастице) можно рассматривать как один из компонентов продукта распыления твёрдых тел. Поэтому эмиссию заряженных наночастиц целесообразно изучать в сопоставлении с эмиссией атомов. Такое сопоставление удобно начать со сравнения закономерностей выхода атомов M_1^+ и многоатомных наночастиц типа M_n^+ от плотности тока бомбардирующих ионов. Экспериментально [1] было установлено, что вероятность эмиссии наночастиц типа M_n^+ во многом определяется присутствием на поверхности разного рода загрязнений. Влияние загрязнений можно свести к минимуму при выборе плотности тока выше определенного значения j_0, когда поверхность можно считать чистой по отношению к вторичной ионной эмиссии. Для этого можно воспользоваться методикой, основанной на исследовании зависимости выхода ионов M_1^+ от j_0, когда должна наблюдаться линейная зависимость функции $M_1^+ = f(j_0)$.

Методика эксперимента. Исследования проводили на установке ВИМС с электромагнитом секторного типа. Первичные ионы направляли на поверхность образца под углом 50° относительно нормали к поверхности. Энергию первичных

ионов E_0 варьировали в интервале 5–10 кэВ. Вакуум в рабочей камере составлял ~5×10^{-7} Па. Распыленные атомы M_1^+ и многоатомные наночастицы M_n^+ вытягивали к входу масс-спектрометра по нормали на поверхность образца. Ионы на выходе масс-спектрометра регистрировали счетчиком ионов типа СИ-04. Мы использовали методику, основанную на исследовании линейной зависимости функции выхода ионов $M_1^+ = f(j_0)$.

Представленная работа посвящена влиянию плотности тока первичных ионов на выход атомных M_1^+ и многоатомных наночастиц M_n^+ при распылении поверхности металлов ускоренными ионами инертных газов.

Обсуждение полученных результатов. Изучены зависимости выхода атомов M_1^+и многоатомных наночастиц типа M_n^+, распыляемых с поверхности Cu, Ni и Ag, от плотности тока бомбардирующих ионов Xe^+ с энергией 6 кэВ. Перед опытами поверхность мишени очищали нагревом до температуры 1200 К при одновременной ионной бомбардировке с плотностью тока 2.5×10^{-3} А/см^2.

Полученные зависимости токов ионов M_1^+ и M_n^+ (температура мишени ~1200 К) от плотности тока бомбардирующих ионов Xe^+ представлены на рис. 1. Как видно, линейная зависимость выхода распыленных ионов M_1^+ от j_0 наблюдается, начиная с $j_0=1.3\times10^{-4}$ А/см^2, т.е. чистота поверхности мишени по отношению к ионной эмиссии наблюдается, когда $j_0 \geq 1.3\times10^{-4}$ А/см^2. В связи с этим сравнение закономерностей выхода ионов M_1^+ и M_n^+ проводили для j_0, превыщающих это значение.

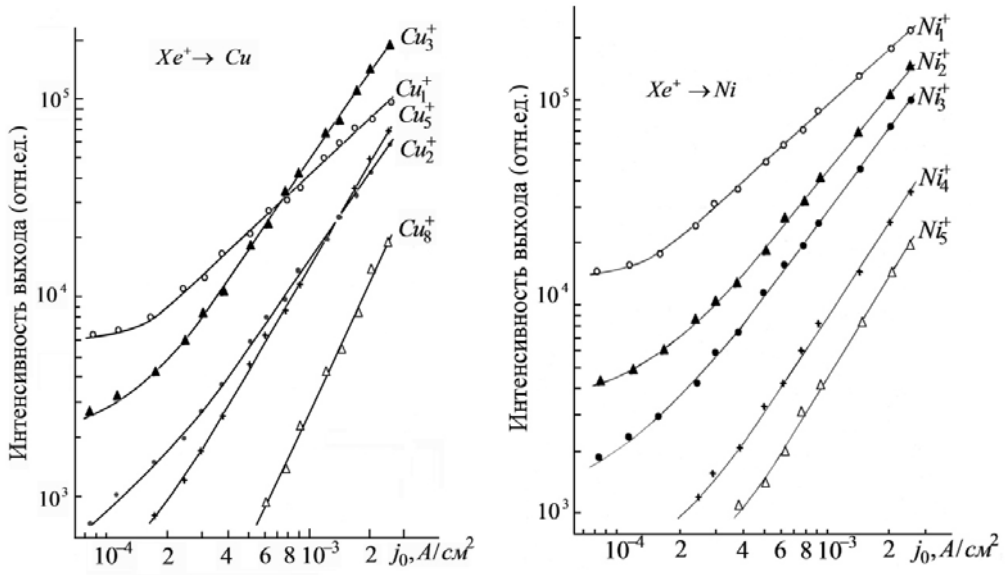


Рис. 1. Токовая зависимость одноатомных M_1^+и многоатомных ионов M_n^+ (слева для Cu, справа для Ni) от плотности тока бомбардирующих ионов Xe^+ с энергией E_0 = 6 кэВ.

При рассмотрении рисунков можно выделить важную функциональную зависимость выхода атомов M_1^+ и многоатомных частиц типа M_n^+ от плотности тока бомбардирующих ионов, а именно: зависимости выхода ионов Cu_1^+ и Ni_1^+ от j_0 имеют одинаковый характер. Выход многоатомных ионов M_n^+ при малых плотностях тока имеет нелинейную зависимость $I(M_n^+) \approx f(j_0^m)$. Показатель степени

больше единицы $m > 1$ и зависит от числа атомов n в ионе M_n^+. Например, для Cu_2^+ и Cu_3^+ значения составляют $m \approx 1.3\pm0.1$, а для ионов Cu_4^+-Cu_7^+ значения m колеблятся в пределах $m\approx1.5-1.6$. Наиболее высокие значения $m \approx 1.8\pm0.1$ наблюдаются для наночастиц типа Cu_8^+ и Cu_9^+.

Аналогичные токовые зависимости обнаруживаются в выходах наночастиц никеля Ni_n^+, где значения $m\approx(1.35-1.6)\pm0.1$ для ионов с $n=2-6$. Для крупных ионов Ni_n^+ ($n \geq 7$), определение показателя m было затруднено из-за быстрого уменьшения их выхода при уменьшении j_0. Для выхода ионов серебра Ag_n^+ ($n = 7-10$) степень показателя функции $I(M_n^+) \approx f(j_0^m)$ достигает значений $m \approx 1.5-2.2$.

Интересным результатом является также то, что относительная доля многоатомных ионов M_n^+ ($n \leq 9$) в общем потоке распыленных частиц увеличивается от 34% до 95% при увеличении плотности тока от 3.5×10^{-4} А/см^2 до 2.5×10^{-3} А/см^2. Отметим, что подобная закономерность была обнаружена нами при увеличении массы бомбардирующих ионов (от $He^+\rightarrow Xe^+$) при неизменном значении j_0 [2].

Также были проанализированы возможные причины нелинейной зависимости выхода заряженных наночастиц типа M_n^+ от плотности тока первичных ионов j_0.

Тепловой разогрев локального микроучастка мишени (диаметр пучка не превышал 10 мкм) при увеличении j_0 может стимулировать испарение вещества в виде частиц M_n с последующей их ионизацией. Однако этот эффект не может быть ответственен за увеличение эмиссии многоатомных наночастиц M_n^+, так как из-за высокой теплопроводности металла тепловая энергия быстро рассеивается из области ионного удара. Кроме того, эмиттированные ионы имеют кинетическую энергию на 2–3 порядка больше, чем тепловая энергия, получаемая за счет испарения [3].

Если каскады столкновений обладают очень высокой плотностью, то может происходить как перекрытие ветвей одного каскада, так и смешивание различных каскадов. Это обстоятельство может привести к нелинейным эффектам, и, как результат, к нелинейному росту выхода наночастиц. Однако, согласно расчетам, приведенным в [2], даже при плотностях тока $j_0 = 10^{-2}$ А/см^2 среднее расстояние между центрами, где развиваются каскады, составляет ~2000 Å. В нашем случае плотность тока на два порядка меньше. Поэтому можно считать, что исключается возможность перекрытия каскадов атомных столкновений.

Заключение. Таким образом, представленные выше результаты свидетельствуют о различии в закономерностях выхода атомов M_1^+ и многоатомных наночастиц M_n^+ от плотности тока бомбардирующих ионов.

Линейная зависимость выхода атомов M_1^+ от j_0 свидетельствует об отсутствии пространственного заряда, наличие которого могло бы привести к изменению траекторий вторичных ионов (особенно многоатомных наночастиц из-за меньшей их кинетической энергии по сравнению с атомами) и, как следствие, к отклонению от линейной зависимости их выхода от j_0.

Следует отметить, что наблюдаемый нелинейный рост выхода многоатомных наночастиц от j_0 не обусловлен приборными эффектами, поскольку условия транспортировки первичного пучка и условия формирования вторичного пучка поддерживались постоянными при изменении j_0.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Т. Черепин. Ионный микрозонд (Киев, Наукова думка, 1994)**.**
2. Р. Курбанов. Диссертация на соискание ученой степени к. ф.-м. н. (Ташкент, 1984).
3. Н.Х. Джемилев, Поверхность. Рентг., синхрот. и нейтрон. исследования, №8, 28, 2012.

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.329-331

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСИ ИТТЕРБИЯ НА ГЕНЕРАЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МДП-СТРУКТУР

Ш.Х. Далиев, М.Б. Бекмуратов

Национальный университет РУз, Ташкент, Узбекистан; shakhrukhd@mail.ru
(Получена 21.06.2019)

CC-DLTS ва юқори частотали вольт-фарада характеристикалар ёрдамида иттербий атомларининг кремнийли МДЯ-структураларнинг электрофизик хусусиятларига таъсири тадқиқ этилган. Иттербий атомларининг кремнийли МДЯ-структураларни ҳажмида мавжудлиги юза ҳолатларнинг зичлигини N_{ss} камайишига олиб келиши аниқланган. Юза ҳолатларининг зичлигини N_{ss} таъқиқланган зона E_g бўйича тақсимотини сезиларли даражада ўзгаришига иттербий атомлари олиб келмаслиги кузатилган.

С помощью CC-DLTS и высокочастотных вольт-фарадных характеристик исследовано влияние атомов иттербия на электрофизические свойства кремниевых МДП-структур. Показано, что присутствие атомов иттербия в объеме кремниевой подложки приводит к уменьшению плотности поверхностных состояний МДП-структур, но не приводит к заметным изменениям распределения плотности поверхностных состояний N_{ss} по ширине запрещенной зоны E_g

The influence of ytterbium atoms on the electrophysical properties of silicon MIS-structures is investigated by means of CC-DLTS and high-frequency volt-farad characteristics. It is shown that the presence of ytterbium atoms in the volume of the silicon substrate leads to a decrease in the density of surface states of MIS-structures. It is found that the presence of Yb atoms in the substrate does not lead to noticeable changes in the density distribution of surface states N_{ss} over the width of the band gap E_g.

Основные параметры МДП-структур в значительной степени зависят от наличия и свойств различных дефектов в диэлектрике, переходном слое Si-SiO_2 и в объеме полупроводника [1-2]. Присутствие дефектных состояний на границе раздела Si-SiO_2 полупроводниковых приборов на основе МДП-структур влияет на такие генерационные характеристики, как пороговое напряжение, крутизна передаточных характеристик, токи утечки, эффективность переноса заряда, шумы, темновые токи и время хранения информационного заряда в ячейках памяти. Причиной нестабильности генерационных характеристик являются также дефекты в диэлектрике, возникающие под влиянием внешних воздействий: введение легирующих примесей, ионизирующее излучение, температура, электрическое поле и другие факторы [3-4]. В связи с этим изучение дефектообразования и изменения электрических свойств системы Si-SiO_2 при внешних воздействиях вызывает интерес широких кругов исследователей, работающих в области полупроводниковой электроники [5-6].

Примеси редкоземельных элементов (РЗЭ), введенные в кремний из расплава при выращивании, обладая высокой химической активностью и склонностью к комплексообразованию, присутствуют в кремнии в электрически неактивном состоянии, но в то же время они оказывают существенное влияние на рабочие характеристики полупроводниковых приборов [7-8].

Целью данной работы является исследование влияния примеси иттербия на электрофизические свойства системы кремний-двуокись кремния с термическим окислом.

Ниже приведены результаты комплексного исследования CC-DLTS и вольт-фарадных характеристик в кремниевых МДП-структурах, легированных иттербием. Для измерений были использованы МДП-структуры на подложках *n*-Si, легированные иттербием в процессе выращивания из расплава. После легирования на пластинках Si с ориентацией <100> и удельным сопротивлением 15 Ом·см наращивали слой SiO_2 толщиной 650–700 Å при 900°C в атмосфере влажного кислорода с добавлением трихлорэтилена. Металлические электроды на SiO_2 площадью 0.03 $см^2$ и толщиной 7000 Å создавали термическим напылением Al.

Измерения ВФХ МДП-структур на основе Si<Yb> показали, что они сдвинуты в сторону положительных напряжений смещения по сравнению с контрольными образцами (рис. 1). Это свидетельствует о том, что введение примеси иттербия в кремний приводит к уменьшению плотности поверхностных состояний МДП-структур и уменьшению величины положительного заряда на границе раздела $Si\text{-}SiO_2$ (относительно контрольных образцов).

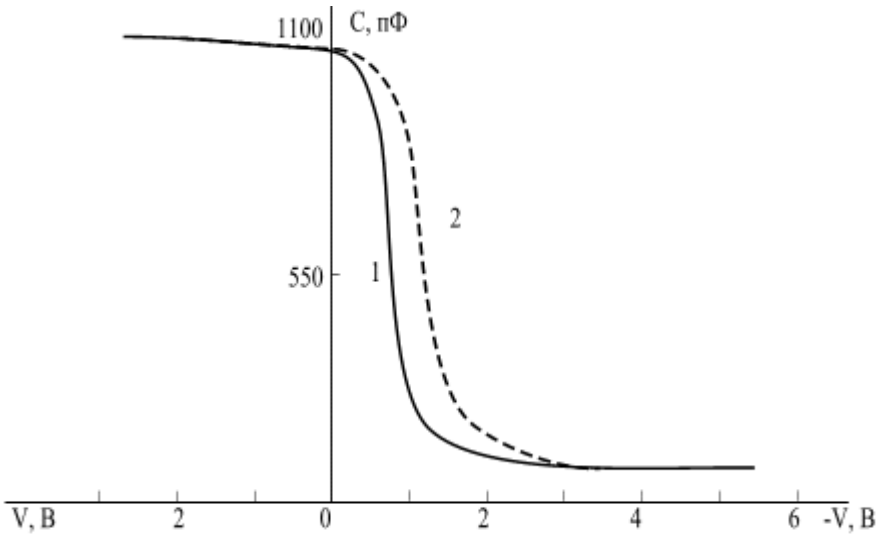


Рис. 1. Высокочастотные *C-V* характеристики МДП-структур на основе Si с Yb (*1*) и контрольных МДП-структур (*2*).

Измерения спектров CC-DLTS в МДП-структурах на основе Si<Yb> и контрольных МДП-структурах (рис. 2) показали, что их спектры несколько различаются, так как при введении иттербия в кремниевую подложку МДП-структур величина N_{ss} уменьшается, в спектрах DLTS каких-либо пиков в заметной концентрации не обнаружено.

Измерение распределения плотности поверхностных состояний N_{ss} по ширине запрещенной зоны E_g полупроводника кремниевых МДП-структур с примесью иттербия и без него показали что спектр распределения $N_{ss}(E_g)$ имеет типичный *U*-образный характер. Анализ полученных зависимостей показал, что наличие атомов

Yb в подложке не приводит к заметным изменениям распределения N_{ss} по E_g и образованию каких-либо явно выраженных пиков.

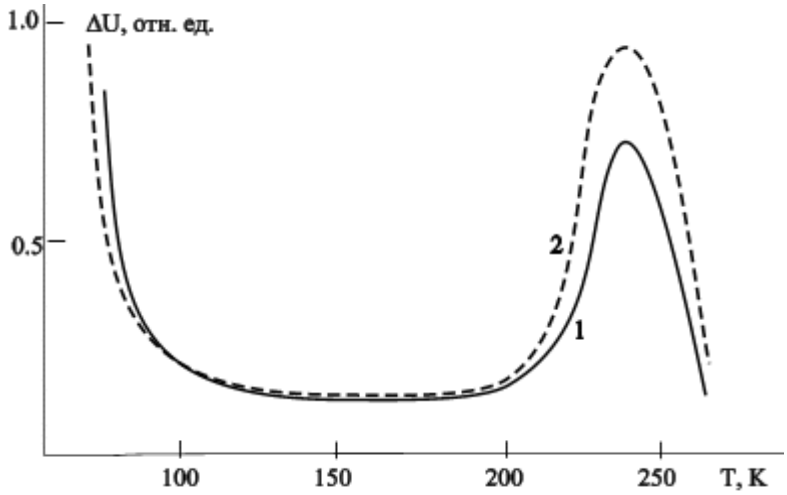


Рис. 2. Спектры CC-DLTS в МДП-структурах на основе Si<Yb> (*1*) и контрольных структурах без Yb (*2*).

Таким образом, присутствие электронейтральной примеси Yb в кремниевой подложке МДП-структур приводит к уменьшению плотности поверхностных состояний МДП-структур, но заметного изменения в распределении N_{ss} по E_g не наблюдается. Предполагается, что после термического окисления кремния при 900^{o}C активируются атомы иттербия и частично компенсируют количество оборванных связей на поверхности кремния.

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Ф. Киселев, С.Н. Козлов. Основы физики поверхности твердого тела (Москва, Мир, 1999).
2. N. Nasuoki, F. Eronides, IEEE Electron Device Letters **9**, №1, 38 (1996).
3. S. Gomes, J. Ziane, Solid State Electronics **47**, 919 (2003).
4. А.А. Скворцов, А.М. Орлов, А.А. Саланов, ПЖТФ **27**, вып.19, 76 (2001).
5. В.С. Вавилов, В.Ф. Киселев, Б.Н. Мукашев. Дефекты в кремнии и на его поверхности (Москва, Наука, 1990).
6. Y. Khlifi, K. Kassmi, A. Aziz, Condensed Matter **6** (1), 20 (2005).
7. Chuanyun Xiao, Jessica Blundell, Frank Hagelberg, A. William, Jr. Lester, International Journal of Quantum Chemistry **96**, Issue 4, 416 (2004).
8. В.В. Емцев, В.В. Емцев (мл.), Д.С. Полоскин, Н.А. Соболев, Е.И. Шек, Й. Михель, Л.С. Кимерлинг, ФТП **33**, Вып. 6, 649 (1999).

Uzbek Journal of Physics

Vol.21(№5) 2019 PP.332-334

ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЕ ПРИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОМ ОТЖИГЕ КРЕМНИЯ, ЛЕГИРОВАННОГО КОБАЛЬТОМ

Ш.Б. Утамурадова, З.О. Олимбеков

Научно-исследовательский институт физики полупроводников и микроэлектроники при Национальном университете Узбекистана, sh-utamuradova@yandex.ru

(Получена 23.01.2019)

Чуқур сатҳлар ностационар сиғимли спектроскопияси усули ёрдамида кобальт атомлари билан легирланган кремнийда паст ҳароратли чуқур сатҳларни қуйдириш жараёнлари ўрганилган. 300°C дан юқори температурада термик ишлов бериш натижасида чуқук сатҳларнинг концентрацияси камайиши аниқланган. Кузатилган чуқур сатҳларнинг қуйдиришни фаоллаштириш энергияси аниқланган.

С помощью нестационарной емкостной спектроскопии глубоких уровней исследованы процессы низкотемпературного отжига глубоких уровней в кремнии, легированном атомами кобальта. Показано, что в *n*-Si<Co> при термообработке при 300°C концентрации всех уровней значительно уменьшаются. Определены энергии активации отжига для всех наблюдаемых уровней в *n*-Si<Co>.

The processes of low-temperature annealing of deep levels in silicon doped with cobalt atoms are investigated by means of deep level transient spectroscopy. It is shown that in *n*-Si<Co> during heat treatment at 300°C concentrations of all levels are significantly reduced. Annealing activation energies for all observed levels in *n*-Si<Co> were determined.

Известно, что наименее изученной примесью среди примесей Т-ионов в кремнии является кобальт и нет однозначного мнения о глубоких уровнях (ГУ), создаваемых Co в Si и о поведении его атомов в решетке кремния. Так, по данным авторов [1-2] с атомами Co в Si связаны глубокие уровни E_v+0.21 эВ, E_v+0.33 эВ. Авторы [3-4] приводят другой спектр ГУ для Co: E_c–0.41 эв и E_v+0.21 эВ. Отметим, что сечения захвата на эти ГУ у разных авторов отличаются более чем на два порядка.

В работе [5] нами было установлено, что диффузионное введение кобальта в кремний приводит к образованию четырех глубоких уровней с фиксированными энергиями ионизации: E_c–0.20 эВ, E_c–0.33 эВ, E_c–0.45 эВ и E_c–0.54 эВ с сечениями захвата носителей заряда $\sigma_n=4\times10^{-17}$ см^2, $\sigma_n=2\times10^{-15}$ см^2, $\sigma_n=1.1\times10^{-15}$ см^2 и $\sigma_n=1.5\times10^{-15}$ см^2 соответственно. Было показано, что в образцах *p*-Si<Co> наблюдается лишь один уровень в нижней половине запрещенной зоны E_v+0.32 эВ с сечением захвата носителей заряда $\sigma_p=2\times10^{-16}$ см^2.

Примеси, создающие глубокие энергетические состояния в запрещенной зоне кремния, как правило, обладают высокой миграционной способностью, и поэтому зачастую ответственны за наблюдаемую нестабильность твердых полупроводниковых растворов [6, 7].

В связи с этим цель настоящей работы – исследовать процессы низкотемпературного отжига глубоких уровней кобальта в кремнии с помощью нестационарной емкостной спектроскопии глубоких уровней (DLTS).

Технология изготовления образцов Si<Co> путем диффузионного легирования и создание барьеров Шоттки детально изложены в работе [5]. Низкотемпературный изотермический отжиг образцов кремния, легированного кобальтом, проводили в интервале температур 100–400°C на воздухе с последующим охлаждением образцов в воде. После каждого цикла отжига определяли концентрацию и параметры каждого глубокого уровня.

Измерения спектров DLTS образцов Si<Co> показали, что глубокие уровни, связанные с атомами кобальта, стабильны до 200°C, дальнейшее повышение температуры изотермического отжига приводит к снижению концентрации наблюдаемых ГУ. На рис. 1 приведены спектры DLTS *n*-Si<Co> после низкотемпературной обработки при 300°C.

Изучение кинетики низкотемпературного отжига (НТО) образцов кремния, легированных примесью кобальта, показало, что атомы Co, как и остальные примеси переходных элементов [6, 7], обладают высокой миграционной способностью, поэтому параметры создаваемых ими глубоких центров (ГЦ) нестабильны.

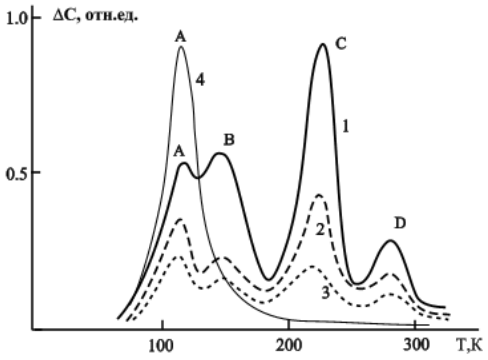


Рис. 1. Спектры DLTS образцов *n*-Si<Co>, подвергнутых низкотемпературному отжигу при 300°C: после диффузии (*1*), после отжига при 300°C, 60 мин (*2*), после отжига при 300°C, 120 мин (*3*), контрольный образец (*4*).

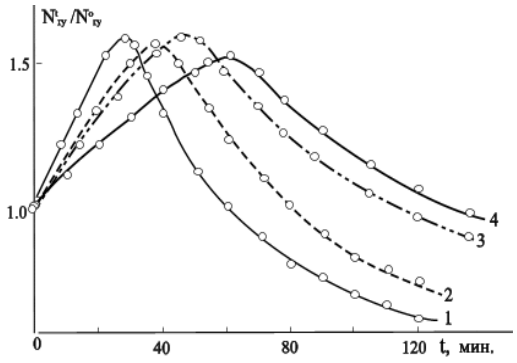


Рис. 2. Кинетика низкотемпературного отжига уровней кобальта в *n*-Si<Co> при 300°C: E_c–0.33 эВ (*1*), E_c–0.45 эВ (*2*), E_c–0.54 эВ (*3*), E_c–0.20 эВ (*4*).

Спектры DLTS показывают, что при изотермическом отжиге концентрации N_t почти всех обнаруженных ГУ кобальта E_c–0.33 эВ (пик B), E_c–0.45 эВ (пик C) и E_c–0.54 эВ (пик D), а также уровня термодефекта E_c–0.20 эВ (пик A) изменяются немонотонно со временем отжига (рис. 2). Как видно из рис. 2, отжиг уровней происходит в две стадии – концентрации всех уровней при малых временах возрастают, затем падают, причем уровни E_c–0.33 эВ и E_c–0.45 эВ отжигаются быстрее остальных уровней. Следует отметить, что с увеличением температуры отжига максимумы на зависимости $N_t(t)$ смещаются в сторону меньших времен.

Методом сечений [8] оценена энергия активации отжига обнаруженных уровней кобальта согласно выражению:

$$\ln\frac{t_1}{t_2} = \frac{E_{отж}}{K}\left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}\right),$$

где t_1 и t_2 – времена, необходимые для уменьшения концентрации ГУ до определенного (одинакового) значения при температурах T_1 и T_2 ($T_1<T_2$).

Расчеты показали, что энергия активации отжига для уровня кобальта в кремнии E_c–0.33 эВ составляет 0.50±0.02 эВ, для E_c–0.45 эВ – 0.53±0.02 эВ, для E_c–0.54 эВ – 1.7±0.02 эВ, а для уровня термодефектов E_c–0.20 эВ она составляет 1.6±0.02 эВ.

Таким образом, результаты низкотемпературного отжига глубоких уровней в кремнии, легированном кобальтом, показали, что кинетика распада твердого раствора кремний-кобальт определяется не одним центром, как сообщалось в [1-2], а несколькими ГУ одновременно. При этом необходимо учитывать глубокие уровни, связанные с дефектами термообработки. Характер отжига уровня E_c–0.20 эВ в легированных и контрольных образцах совпадает, это свидетельствует о том, что ГУ E_c–0.20 эВ в n-Si<Co> не связан с кобальтом, а является термодефектом.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Б.И. Болтакс, М.К. Бахадырханов, С.М. Городецкий, Г.С. Куликов. Компенсированный кремний (Ленинград, 1972).
2. Л. Милнс. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках (Москва, Мир, 1977).
3. К. Рейви. Дефекты и примеси в полупроводниковом кремнии. Пер. с англ. (Москва, Мир, 1984).
4. Э.М.Омельяновский, В.И. Фистуль. Примеси переходных металлов в полупроводниках (Москва, 1983).
5. Sh.B. Utamuradova, Z.O. Olimbekov, World Journal of Engineering Research and Technology (WJERT) **4**, Issue 2, 139 (2018).
6. Физика и материаловедение полупроводников с глубокими уровнями. Под ред. В.И. Фистуля (Москва, 1987).
7. В.И.Фистуль, В.А. Шмугуров, ФТП **23**, в. 4, 677 (1989).
8. В.И.Фистуль. Распад пересыщенных полупроводниковых твердых растворов (Москва, Металлургия, 1977).

Uzbek Journal of Physics
Vol.21(№5) 2019 PP.325-342

ИНФОРМАЦИЯ ДЛЯ АВТОРОВ

1. Общие требования к подаче материалов

Редакция принимает материалы на русском и/или английском языках. Материалы, поданные на английском языке, в журнале публикуются в оригинале, на русский язык переводится только аннотация.

Прием материалов к рассмотрению осуществляется через электронный сайт **http://ufj.uz**

При онлайн регистрации необходимо руководствоваться пошаговыми инструкциями по загрузке файлов. После загрузки система автоматически преобразует их в один PDF-файл, который будет использоваться в процессе рецензирования. Рекомендуем перед отправкой проверить корректность отображения представленных материалов, прежде всего формул, таблиц, иллюстраций.

Редакция не принимает к опубликованию материалы без рекомендации (письма) научной или научно-производственной организации, название и адрес которой указываются в рукописи.

Текст статьи рекомендуется разбивать на разделы с рубрикой типа: введение и постановка задачи, методы и материалы, результаты исследования, обсуждение, заключение, благодарности (acknowledgements), литература (references).

Рукопись должна быть окончательно проверена и одобрена всеми соавторами.

При использовании в тексте сокращенных названий следует давать их расшифровку при первом упоминании.

Обзорные статьи представляются в журнал исключительно по приглашению (заказу) редакции.

Так как статьи для проверки рассылаются авторам только по электронной почте, то в случае, когда у статьи только один автор, желательно указать альтернативный адрес электронной почты на случай возможных технических проблем. В качестве альтернативного рекомендуется указывать почтовый ящик, который проверяется во время отпуска или командировки. Если у статьи несколько авторов, желательно указать адреса электронной почты двух или трех авторов, которые регулярно проверяют поступающие сообщения.

2. Требования к элементам статьи

Название статьи, максимально конкретное и информативное. Название статьи должно строго соответствовать ее содержанию, быть лаконичным, простым и однозначным для перевода на английский/русский язык.

Полный список авторов (инициалы и фамилии), необходимо указать, кто из авторов ответственен за переписку.

Место работы авторов. Полное (без сокращений) название организации с указанием почтового индекса города, страны на русском и английском языках. Если авторы работают в разных организациях, то должно быть понятно, кто и в какой именно организации работает.

Электронный адрес и телефон автора (или авторов), ответственного за переписку.

Аннотация статьи (на русском и английском языках). Аннотация статьи объемом до 200 слов должна быть информативной и подробной, описывать методы и главные результаты исследования. Аннотация не должна содержать ссылок на другие работы. Из аннотации должно быть ясно, какие вопросы поставлены для исследования и какие ответы на них получены. Не допускается использование сокращений и условных обозначений в аннотациях.

Ключевые слова (на русском и английском языках) должны содержать не более 8 слов или коротких словосочетаний, точно отражающих содержание статьи, но, по возможности, не повторяющих ее название.

3. Технические требования к оформлению

Все текстовые файлы, включая таблицы, должны быть подготовлены в текстовом редакторе Microsoft Word for Windows в форматах **.doc** или **.docx**. Формат страниц А4, поля со всех сторон – 2,0 см. Текст должен быть черного цвета, межстрочный интервал (за исключением таблиц и списка литературы) – не менее 1,15. Абзацный отступ – 1,00. Весь текст набирается шрифтом Times New Roman, кегль 12.

3.1. Основной текст

Необходимо загрузить Word-файл с текстом статьи, включая список цитируемой литературы. Текст предваряется названием с указанием авторского коллектива и его аффилиации. Название пишется прописными буквами, полужирным шрифтом и выравнивается по центру (шрифт Times New Roman, кегль 14, в конце точка не ставится). Далее одна строка пропускается и через запятую перечисляются соавторы статьи (шрифт Times New Roman, кегль 11, полужирным, выключка по центру). Впереди пишутся инициалы, затем фамилия (И.И. Андреев, К.В. Вахидов). После фамилии каждого из авторов ставится сноска с номером организации (если организация одна для всех авторов, номер ставить не следует); после фамилии автора, чей электронный адрес приводится для контактов, ставится звездочка. Снова пропускается строка и приводится название и адрес аффилированной организации шрифтом Times New Roman, уменьшенным кеглем 10, выключка по центру. Каждая организация пишется с новой строки, выравнивание по центру, при необходимости записи нумеруются.

А**ннотация** и **ключевые слова** статьи набираются шрифтом Times New Roman, кегль 11. Ниже располагается перевод **на английский язык**: названия

статьи, фамилий авторов, названий и адресов организаций, в которых выполнена работа, электронного адреса (e-mail) автора ответственного за переписку, аннотации (abstract) (перевод должен быть качественным и грамотным, объем до 200 слов) и ключевых слов.

После ключевых слов, пропуская строку, представляется наиболее соответствующий материалам статьи **PACS номер** (набор текста – шрифт Times New Roman, кегль 11, все прописные).

Основной текст отделяется от заглавия пустой строкой. Название разделов статьи набирается полужирным и прописными буквами, выравнивается по центру, в конце точка не ставится и отделяется от предыдущего раздела пустой строкой (шрифтом Times New Roman, кегль 11). Подзаголовки разделов набираются по мере углубления иерархии сначала полужирным курсивом, потом обычным курсивом, потом обычным шрифтом с подчеркиванием, выключка по центру, в конце точка не ставится.

Текст раздела набирается нормальным шрифтом без переносов с выравниванием по ширине. Строки не нумеруются. Ссылки на рисунки и таблицы должны быть в порядке упоминания их в тексте и даются в круглых скобках (рис. 1, табл. 1). Упомянутые в статьях единицы измерения должны соответствовать международной системе единиц СИ. Формулы должны быть выполнены в редакторе MathType, который встроен в Word. Размер символов: обычный символ – 12 pt, крупный индекс – 7 pt, мелкий индекс – 5 pt, крупный символ – 14 pt., мелкий символ –12 pt. Занумерованные формулы обязательно включаются в красную строку, номер формулы ставится у правого края. Желательно нумеровать лишь те формулы, на которые имеются соответствующие ссылки в тексте.

Благодарности и ссылки о поддержке грантами с указанием их номеров приводятся в конце основного текста.

3.2. Рисунки и таблицы

Рисунки принимаются только в компьютерном исполнении размером 7×7 см (большие рисунки не более 13×13 см) в формате типа bmp, gif, eps, tiff, ps и т.п. Рисунки должны иметь разрешение не ниже 300 dpi. Для графиков следует использовать стандартные программы типа Origin, позволяющие при необходимости редактировать их.

Подписи к рисункам (шрифт Times New Roman 10 pt) должны компенсировать минимум буквенных и цифровых обозначений, представленных на рисунке. Запись начинается с номера рисунка, который записывается кратко с прописной буквы полужирным шрифтом (Рис.), после номера ставится точка. Рисунки располагаются в тексте статьи после первого упоминания о них. Каждый рисунок дополнительно представляется в виде отдельного графического файла с разрешением не менее 300 dpi (точек на дюйм) в формате **TIFF** (*TIFF–файлы должны быть сохранены без сжатия и иметь реальный размер не менее 100x100*

мм); в названии файла рисунка должна присутствовать фамилия первого автора и номер рисунка (например, makarova_1.tiff).

Таблицы нумеруются по порядку упоминания их в тексте арабскими цифрами. После номера должно следовать название таблицы. Все графы в таблице должны иметь заголовки и разделены вертикальными линиями. Сокращение слов в таблицах не допускается. Использование других форматов, в том числе Microsoft Excel, не допускается. Подпись к таблице располагается по центру, слово «Таблица» и номер набираются курсивным шрифтом с правой стороны, название таблицы набирается полужирным шрифтом с большой буквы с новой строки, в конце точка не ставится (шрифт Times New Roman 10 pt). Таблица должна быть расположена в тексте статьи сразу после упоминания или как можно ближе к месту первого упоминания. Ссылка в тексте на таблицу дается в формате – табл. 1.

3.3. Список исползованной литературы

Список использованной литературы набирается шрифтом Times New Roman, кегль 11. Список литературы должен быть составлен в порядке цитирования в тексте и располагаться в конце статьи. Порядковые номера ссылок в тексте должны быть написаны внутри квадратных скобок (например: [1], [2]).

В литературе должно быть не менее 25 ссылок (из них желательно указывать не менее 15 ссылок на научные статьи из журналов). В литературу должны входить ссылки на актуальные научные работы узбекских и зарубежных специалистов, в первую очередь статьи, опубликованные за последние 10–15 лет в рецензируемых научных периодических изданиях (в первую очередь входящих в базу данных Scopus и WOS). **С**ледует избегать необоснованного самоцитирования, в большинстве случаев уровень самоцитирования не должен превышать 20–30%. После списка литературы приводится его транслитерация в разделе **References**. Транслитерация и перевод названия применяется только для русскоязычных источников из списка литературы. Англоязычные источники повторяются в разделе References без изменений. В литературе и в References указать DOI (Digital Object Identifier) публикации в конце каждой ссылки (при наличии).

В списке литературы указываются: имя (или инициал) и затем фамилия всех авторов, название статьи (или главы, статьи для конференции, патента и т. д.) должно быть в кавычках, название журнала или книги должно быть выделено курсивом, том, номер, нумерация первой и последней страницы через дефис, год издания.

Примеры оформления приведены ниже:

Статья в журнале: И.О.Ф. всех авторов, “Название статьи”, *Название журнала*, Том, Номер, стр., год.

Например: [12] A. Jákli, O.D. Lavrentovich, and J.V. Selinger. “Physics of liquid crystals of bent-shaped molecules”, *Reviews of Modern Physics*, vol. 90, no. 4, pp. 352-364, 2018. doi.org/10.1103/RevModPhys.90.045004

***Книга*:** И.О.Ф. авторов, *Название книги*. Место издания, Издательская компания, год, стр.
Например: [15] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics.* New York: John Willey&Sons Inc., 1956.

***Статья или тезис в сборнике*:** И.О.Ф. авторов, “Название статьи”, в Название сборника конференции, год., стр.
Например: [18] G. Petratos, and M. Katramatou, “A Novel Experiment on the Quark-Gluon Structure of the Proton and Neutron”, In Forth Annual International Symposium on Physics (Athens, Greece), 18-21 July 2016, pp. 55-56.

Отдельно прилагаются:

а) направление учреждения, в котором выполнена работа (1 экз.);

б) адрес, электронная почта и контактный телефон авторов. Рисунки, таблицы и подписи к ним следует также поместить в отдельный файл или в конец статьи.

Просим авторов строго придерживаться перечисленных правил оформления рукописей. Рукописи, оформленные с нарушением правил, рассматриваться не будут.

Редколлегия

ПРИМЕР ОФОРМЛЕНИЯ

Динамика намагниченности в массиве трехслойных нанодисков

В.С. Орлов[1,2,*], О.С. Зарубин[1], А.Б. Иванов[1]

[1]Институт спектроскопии РАН,
Россия, 108840, Москва, ул. Физическая, д. 5
тел.: +8(495) 851-05-79
[2]Институт физических проблем им. П.Л. Капицы РАН,
Россия, 119334, Москва, ул. Косыгина, д. 2
тел.: +8(499)137-32-48; [*]*e-mail: boris_so@gmail.com*

Аннотация. Аннотация статьи объемом до 200 слов должна быть информативной и подробной, описывать методы и главные результаты исследования. Аннотация не должна содержать ссылок на другие работы. Из аннотации должно быть ясно, какие вопросы поставлены для исследования и какие ответы на них получены. Не допускается использование сокращений и условных

обозначений, кроме общепринятых. Какие-либо библиографические ссылки не допускаются. Аннотация и ключевые слова статьи набираются шрифтом Times New Roman, кегль 11.

Ключевые слова: они должны содержать не более 8 слов или коротких словосочетаний, точно отражающих содержание статьи, но, по возможности, не повторяющих ее название. Они приводятся через запятую.

PACS

Dynamics of magnetization in an array of three-layer nanodiscs

V.S. Orlov[1,2,*], O.S. Zarubin[1], A.B. Ivanov[1]

[1]Institute of Spectroscopy of the Russian Academy of Sciences,
5, Fizicheskaya str., 108840, Moscow, Russia
tel.: +8(495) 851-05-79
[2]Institute of Physical Problems named after P.L. Kapitsa,
2, Kosigin str., 119334, Moscow, Russia
tel.: +8(499)137-32-48; [*]*e-mail:* boris_so@gmail.com

Abstract. Дается перевод аннотации на английский язык объемом до 200 слов. Перевод должен быть качественным. При переводе аннотации должна использоваться англоязычная специальная терминология. Английский вариант не должен быть механическим переводом русского текста, а обеспечивать понимание сути работы для иностранных читателей.

Keywords: Перевод ключевых слов на английский язык.

ВВЕДЕНИЕ

Этот раздел включает:

- актуальность темы исследования;
- краткий обзор литературы по теме исследования;
- постановку проблемы исследования;
- формулировку целей представленной статьи;
- формулировку тех конкретных задач, которые решают авторы для их достижения.
-

МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ

Этот раздел должен содержать описание:

- экспериментальных или теоретических методов, используемых авторами в работе;
- материалов лабораторных или полевых исследований, данных сетевых наблюдений или иных материалов, используемых в работе, или же информации, заимствованной из литературных научных источников. Все методы и материалы, не являющиеся оригинальными авторскими, необходимо приводить со ссылками.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В этом разделе представляют фактические результаты исследования (текст, таблицы, графики, диаграммы, уравнения, фотографии, рисунки) и интерпретацию полученных результатов исследования, включая:

- соответствие полученных результатов гипотезе исследования;
- ограничения исследования и обобщения его результатов;
- предложения по практическому применению;
- предложения по направлению будущих исследований.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Содержит краткие итоги разделов статьи без повторения формулировок, приведенных в них.

БЛАГОДАРНОСТИ (ACKNOWLEDGMENTS)

В этом разделе автор выражает:

- признательность коллегам за помощь:
- благодарность за финансовую поддержку исследования.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № XXXX.

ЛИТЕРАТУРА

[1] A. Jákli, O.D. Lavrentovich, and J.V. Selinger. “Physics of liquid crystals of bent-shaped molecules”, *Reviews of modern physics*, vol. 90, no. 4, pp. 352-364, 2018. doi.org/10.1103/RevModPhys.90.045004

[2] N.V. Sibirev, M.V. Nazarenko, G.E. Cirlin, Yu.B. Samsonenko, and V.G. Dubrovskii, “The Initial Stage of Growth of Crystalline Nanowhiskers”,

Semiconductors, vol. 44, no. 1, pp. 112–115, 2010. https://doi.org/10.1134/S1063782610010197

[3] И.Е. Кареев, В.П. Бубнов, Э.К. Алиджанов, С.Н. Пашкевич, Ю.Д. Лантух, С.Н. Летута, Д.А. Раздобреев, “Кластерообразование эндоэдральных металлофуллеренов с Y, Gd, Ho в растворе и на поверхности твердого тела”, *Физика твердого тела*, том 58, № 9, С. 1859-1863, 2016. https://doi.org/10.1134/S106378341609016X

[4] …

REFERENCES

[1] A. Jákli, O.D. Lavrentovich, and J.V. Selinger. “Physics of liquid crystals of bent-shaped molecules”, *Reviews of modern physics*, vol. 90, no. 4, pp. 352-364, 2018. doi.org/10.1103/RevModPhys.90.045004

[2] N.V. Sibirev, M.V. Nazarenko, G.E. Cirlin, Yu.B. Samsonenko, and V.G. Dubrovskii, “The Initial Stage of Growth of Crystalline Nanowhiskers”, *Semiconductors*, vol. 44, no. 1, pp. 112–115, 2010. https://doi.org/10.1134/S1063782610010197

[3] I.E. Kareev, V.P. Bubnov, E.K. Alidjanov, S.N. Pashkevich, Yu.D. Lantux, S.N. Letuta, D.A. Razdobreev, “Klasteroobrazovanie endoedralnix metallofullerenov s Y, Gd, Ho v rastvore i na poverxnosti tverdogo tela,” [Cluster formation of endohedral metallofullerenes with Y, Gd, Ho in solution and on the surface of a solid], *Fizika tverdogo tela*, vol. 58, No. 9, pp. 1859-1863, 2016. (in Russian).

[4] …

ISSN 1025-8817

O‘ZBEKISTON FIZIKA JURNALI

1957 yilda tashkil topgan
Yilda 6 marta chiqadi

UZBEK JOURNAL OF PHYSICS

УЗБЕКСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Founded in 1957
Published 6 times a year

Основан в 1957 г.
Выходит 6 раз в год

Volume 21 **Number 5** **September-October 2019**

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

Э.А. ЗАХИДОВ (главный редактор),
Д.Т. АЛИМОВ, М.Х. АШУРОВ, Х. Б. АШУРОВ (зам. гл. редактора),
С.А. БАХРАМОВ, Э.М. ИБРАГИМОВА, С.Л. ЛУТПУЛЛАЕВ,
Р.А. МУМИНОВ (зам. гл. редактора), Г.И. МУХАМЕДОВ, У.Х. РАСУЛЕВ,
У.С. САЛИХБАЕВ, Ф.Т. УМАРОВА (ответственный секретарь),
У.Н. ТАШКЕНБАЕВ, Ш.А. ЭГАМБЕРДЫЕВ

Адрес редколлегии:
100125 Ташкент, Мирзо Улугбекский р-н, ул. Дўрмон йўли, 33
Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз
Тел.: 998-71-262-31-69, 998-90-325-15-31; Fax: 998-71-262-32-54

O‘zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasi
Академия наук Республики Узбекистан

© Академия наук Республики Узбекистан, Ташкент, 2019