ISSN 1025-8817 (Print)
ISSN 2181-077X(Online)

Академия Наук Республики Узбекистан

УЗБЕКСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Том 23, № 4, Октябрь-Декабрь, 2021

Журнал основан в 1957 году

Учредитель: Академия Наук Республики Узбекистан

Издается на базе Института ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова АН РУз

СОДЕРЖАНИЕ

Б. Абдуллаев, У. Роесслер, Ч.-Х. Парк, М.М. Мусаханов. Возможные состояния дробного квантового эффекта Холла и вигнеровского кристалла в двумерных кулоновских газах как результат энионных корреляций …… 1

М.С. Надирбеков, О.А. Бозаров. Эффективная неаксиальность четно-четных ядер с квадрупольной и октупольной деформациями …… 8

G. Gulyamov, Б.Т. Абдулазизов, М.С. Тохиржонов, П.Ж. Байматов. Одночастичная энтропия в двумерном электронном газе в узкозонных полупроводниках ……. 19

Р.Я. Расулов, В.Р. Расулов, И. Эшболтаев, М.Х. Кучкаров. К теории трех и четырех фотонного линейно-циркулярного дихроизма в *p*-GaAs 27

М.Б. Марасулов, Н.Н. Тураева, Б.Л. Оксенгендлер. Ферми приближение к размерному эффекту генерации множественных экситонов в наноструктурах ... 32

У.Б. Шаропов. Спектроскопия полного тока окисленного кремния …… 38

С.З. Зайнабидинов, А.Й. Бобоев, Д.П. Абдурахимов. Получение, морфология и фотоэлектрические свойства эпитаксиальных пленок $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ на основе GaAs ……. 45

М.Ю. Ташметов, Ф.К. Халлоков, Н.Б. Исматов, С.Х. Умаров. Влияние ускоренных электронов на структуру, размер кристаллитов и поверхность кристаллов $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ с x=0.01 ……. 51

Б.И. Курбанов, Е.А. Данилова, Н.С. Осинская, С.Х. Хуснидинова, С.Ю. Турдиев, Н.Х. Хушвактов, Х.Ш. Фармонов. Нейтронно-активационный анализ в экологических исследованиях объектов окружающей среды …… 57

Ш.А. Аликулов, С.А. Байтелесов, Ф.Р. Кунгуров, Д.П. Таджибаев, Д.Д. Тожибоев. Влияние нейтронного излучения на электропроводность алюминиевого сплава САВ-1 ……. 65

В.М. Ротштейн, Х.Б. Ашуров, Р.Х. Ашуров. Экспериментальное обоснование эффективности использования метода спектроскопии КР в процессе комплексных аналитических исследований ……. 70

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

Б.Ж. Ахмедов, д.ф.м.н., Астрономический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан, тел. +998 97 708 80 68, ahmedov@astrin.uz - главный редактор
М.Ш. Курбанов, д.т.н., Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, тел. +998 97 752 14 85, kurbanov@iplt.uz – зам.главного редактора
Ф.Т. Умарова, к.ф.м.н., Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, тел. +998 90 325 15 31, umarova_inp@mail.ru - ответственный секретарь
Ф.Х. Абдуллаев, д.ф.м.н., Физико-технический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан, fatkhulla@yahoo.com
М.Х. Ашуров, акад., «Фонон», Ташкент, Узбекистан, ashurov49@mail.ru
Х.Б. Ашуров, д.т.н., Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, ashurov@iplt.uz
С.А. Бахрамов, акад., Академия наук РУз, Ташкент, Узбекистан, bahramov@mail.ru
Р.А. Ганеев, д.ф.м.н., Воронежский государственный университет, Россия, rashid_ganeev@mail.ru
С.В. Гарнов, проф. Директор Института общей физики им. Прохорова, Москва, Россия, garnov@kapella.gpi.ru
К.Г. Гуламов, акад., Физико-технический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан, gulamov@uzsci.net
А.А. Захидов, проф., Техасский университет, Даллас,США, zakhidov@utdallas.edu
Э.М. Ибрагимова, д.ф.м.н., Институт ядерной физики АН РУз, Узбекистан, ibragimova@inp.uz
К.К. Кадиржанов, проф. Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, Нур Султан, kadyrzhanov1945@gmail.com
Д.И. Казаков, д.ф.м.н., Директор Боголюбовской лаборатории теоретической физики, Дубна, kazakovd@theor.jinr.ru
T. Kajino Toshitaka, проф., Национальная астрономическая обсерватория, Япония, kajino@nao.ac.jp
С. Кивалов, Doctor Sc., Институт исследований глобальных изменений, Чешская Академия наук, Чехия, kivalov.s@czechglobe.cz
А.П. Кузнецов, д.ф.м.н., Национальный исследовательский ядерный университет, Россия, APKuznetsov@merphi.ru
Г. Лубатти, проф. Вашингстонского университета, США, lubatti@uw.edu
Н.Т. оглы Мамедов, акад., Директор Института физики Национальной академии Азербайджана, director@physics.ab.az
З.А. Мансуров, проф.,Институт проблем горения, Казахстан, ZMansurov@kaznu.kz.
С.З. Мирзаев, д.ф.м.н., Академия наук РУз, Узбекистан, mirzaev@web.de
К.М. Мукимов, акад., Национальный университет РУз, Ташкент, Узбекистан, kmukimov@mail.ru
Р.А. Муминов, акад., Физико-технический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан, detector@uzsci.net
М.М. Мусаханов, акад., Национальный университет РУз,Ташкент, Узбекистан, yousufmm@list.ru
А.И. Никифоров,д.ф.м.н., Институт физики полупроводников им. Ржанова, Сибирское отделение РАН, nikif@isp.nsc.ru
С. Ниномия, PhD, Университет Яманаши, Япония, sninomiya@yamanashi.ac.jp
Б.Л. Оксенгендлер, д.ф.м.н., Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, oksengendlerbl@yandex.ru
В.А. Орлович, акад., Институт физики Национальной Академии наук, Беларусь v.orlovich@dragon.bas-net.by
В.Я. Панченко, акад., Председатель Chairman of the board RFBR, Москва, Россия, vpanch@rfbr.ru
Л. Реззолла, проф., Директор Института теоретической физики, Франкфурт, Германия, rezzolla@itp.uni-frankfurt.de
Л.М. Сабиров, д.ф.м.н., Самаркандский университет, Самарканд, Узбекистан, sabirov@gmail.com
Г.Ф. Смут, проф., Калифорнийский университет, США, <gfsmoot@lbl.gov>
М. Ж. Soileau, проф., вице-президент Научного Университета, Флорида, MJ@ucf.edu
М.Ю. Ташметов, д.ф.-м.н., Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент, Узбекистан, mannab@inp.uz
Ф.Ф. Умаров, проф., Казахско-Британский технический университет, Казахстан, farid1945@yahoo.com
И.Г. Хидиров, д.ф.-м.н., Институт ядерной физики АН РУз, Узбекистан, khidirov@inp.uz
А.М. Шалагин, акад., Институт автоматики и электрометрии, Новосибирск, Россия, shalagin@iae.nsc.su
И.А. Щербаков, акад., Институт общей физики им. Прохорова, Москва, Россия, ivan@kapella.gpi.ru
Ш.А. Эгамбердиев, акад., Астрономический институт АН РУз, Узбекистан, shuhrat@astrin.uz
Б.С. Юлдашев, акад., Академия наук РУз, Ташкент, Узбекистан, yuldbekh@gmail.com

Издание зарегистрировано Агентством по печати и информации Республики Узбекистан 22.12.2006.
Регистрационный номер 0045
Набор и верстка выполнены в редакции журнала «Узбекский физический журнал»

Подписано в печать 15.10.2021. Формат 60×84 ⅛. Усл. печ. л. 7,0. Уч. изд. л. 8,75. Тираж 120. Заказ №112704

Адрес редакции: Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова АН РУз, Мирзо Улугбекский р-н, ул. Дўрмон йўли, 33, 100125, Ташкент, Узбекистан
Тел.: 998-71-262-31-82, +998903251531, Fax: 998-71-262-31-83
Отпечатано: ООО «POLYGRAPHIC TECHNOLOGY»
Ташкент, ул. Катта Миробод, 1-тор, д.18А, Тел. 90 926 25 26.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

ISSN 1025-8817 (Print)
ISSN 2181-077X(Online)

Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan

UZBEK JOURNAL OF PHYSICS

Volume 23, Number 3, October-December, 2021

Journal is founded in 1957 year

Founder: Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan

Journal is published in the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan

CONTENTS

B. Abdullaev, U. Roessler, C.-H. Park, M.M. Musakhanov. Possible fractional quantum Hall effect and Wigner crystal states in two-dimensional Coulomb gases as a result of anyon correlations ……... 1

M.S. Nadirbekov, O.A. Bozarov. Effective triaxiality of even-even nuclei with quadrupole and octupole deformations …… 8

G. Gulyamov, B.T. Abdulazizov, M.S. Tokhirjonov, P.J. Baymatov. Single-particle entropy in two-dimensional electron gas in a narrow-band semiconductors …… 19

R.Ya. Rasulov, V.R. Rasulov, I. Eshboltaev, M.Kh. Kuchkarov. On the theory of three and four photon linear-circular dichroism in *p*-GaAs …… 27

M.B. Marasulov, N.N. Turaeva, B.L. Oksengendler. Fermi approach to the dimension effect of multiple exciton generation in nanostructures ……. 32

U.B. Sharopov. Total current spectroscopy of silicon oxide …….. 38

S.Z. Zaynabidinov, A.Yu. Boboev, D.P. Abdurakhimov. Receipt, morphology, and photoelectrical properties of epitaxial films of $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ on GaAs substrates …… 45

M.Yu. Tashметov, F.K. Khallokov, N.B. Ismatov, S.Kh. Umarov. Influence of accelerated electrons on the structure, crystallite size and surface of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ crystal with $x = 0.01$ ……. 51

B.I. Kurbanov, E.A. Danilova, N.S. Osinskaya, S.Kh. Khusniddinova, S.Yu. Turdiev, N.Kh. Khushvaktov, Kh.Sh. Farmonov. Neutron-activation analysis in ecological research of environmental objects …… 57

Sh.A. Alikulov, S.A. Baytelesov, F.R. Kungurov, D.P. Tadjibaev, D.D. Tojibaev. Influence of neutron radiation on the electrical conductivity of the SAV-1 ……..... 65

V.M. Rotshteyn, Kh.B. Ashurov, R.Kh. Ashurov. Experimental substantiation of the efficiency of using the Raman spectroscopy method in the complex analytical studies e ……... 70

EDITORIAL BOARD

B.J. Ahmedov, Prof., Ulughbeg Astronomical Institute, Uzbek Academy of Sciences, Tashkent, Uzbekistan, tel. +99897-7088068, ahmedov@astrin.uz – editor-in-chief
M.Sh. Kurbanov, doct. tech. sc., Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan, Tashkent, tel. +99897 752 14 85, kurbanov@iplt.uz –deputy of editor-in-chief
F.T. Umarova, PhD, Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan, Tashkent, tel. +998 90 325 15 31, umarova_inp@mail.ru – responsible secretary
F.Kh. Abdullaev, Prof., Physical-Technical Institute of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, fatkhulla@yahoo.com
M.Kh. Ashurov, Acad., "Fonon", Tashkent, Uzbekistan, ashurov49@mail.ru
Kh.B. Ashurov, Prof., Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan, ashurov@iplt.uz
S.A. Bahramov, acad., Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, bahramov@mail.ru
R.A. Ganeev, Prof., Voronezhskiy Gosudarstvenniy Universitet, Russia, rashid_ganeev@mail.ru
S.V. Garnov, Doctor Sc., Prof., Director of Prokhorov General Physics Institute, Russia, Moscow, garnov@kapella.gpi.ru
K.G. Gulamov, Acad., Physical-Technical Institute of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, gulamov@uzsci.net
A.A. Zakhidov, Prof., University of Texas at Dallas, Dallas, USA, zakhidov@utdallas.edu
E.M. Ibragimova, Prof., Institute of Nuclear Physics of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, ibragimova@inp.uz
K.K. Kadirjanov, Prof., The Eurasian National University L.N. Gumilyov, Nur Sultan, kadyrzhanov1945@gmail.com
D.I. Kazakov, Doctor Sc., Corresponding Member of RAS, Director of Bogoliubov laboratory of theoretical physics, Dubna, kazakovd@theor.jinr.ru
Toshitaka Kajino, д-р, проф., National Astronomical Observatory of Japan, kajino@nao.ac.jp
S. Kivalov, Doctor Sc., Institute of investigation of global changes, CzeychGlobe, Czechia, kivalov.s@czechglobe.cz
A.P. Kuznetsov, Doctor Sc., National Research Nuclear University MIPhI, Russia, +7903-6613049, APKuznetsov@merphi.ru
H. Lubatti, Prof., University of Washington, lubatti@uw.edu
N.T.O. Mamedov, acad., Director of the Institute of Physics National Academy of Azerbaijan, director@physics.ab.az
Z.A. Mansurov, Doctor Sc., Prof., Combustion Problems Institute, Kazakhstan, ZMansurov@kaznu.kz.
S.Z. Mirzaev, Prof., Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, mirzaev@web.de
K.M. Mukimov, acad., National University of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, kmukimov@mail.ru
R.A. Muminov, acad., Physical-Technical Institute of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, detector@uzsci.net
M.M. Musahanov, acad., National University of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, yousufmm@list.ru
A.I. Nikifirov, Doctor Sc., Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch of RAN, nikif@isp.nsc.ru
Satoshi Ninomiya, PhD, University of Yamanashi, Japan, sninomiya@yamanashi.ac.jp
B.L. Oksengendler, Prof., Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of AS RUz, Tashkent, oksengendlerbl@yandex.ru
V.A. Orlovich, acad., B.I. Stepanov Institute of Physics of the NAS, Belarus, v.orlovich@dragon.bas-net.by
V.Ya. Panchenko, acad., Chairman of the board RFBR, Moscow, Russia, vpanch@rfbr.ru
L. Rezzolla, Prof., The Director of the Institute of Theoretical Physics, Frankfurt, Germany, rezzolla@itp.uni-frankfurt.de
L.M. Sabirov, Prof., Samarkand University, Uzbekistan, sabirov@gmail.com
G.F. Smoot, Prof., University of California, США, George F Smoot III, <gfsmoot@lbl.gov>
M.J. Soileau, Prof., Vice-President of the University of Florida for Science, MJ@ucf.edu
M.Yu. Tashmetov, Prof., Institute of Nuclear Physics of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, mannab@inp.uz
F.F. Umarov, Prof., Kazakh-British Technical University, Kazakhstan, farid1945@yahoo.com
I.G. Khidirov, Prof., Institute of Nuclear Physics of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, khidirov@inp.uz
A.M. Shalagin, acad., Institute of Automation and Electrometry, S.B. R.A.Sc., Novosibirsk, Russia, shalagin@iae.nsc.su
I.A. Sherbakov, acad. Prokhorov General Physics Institute, Russia, ivan@kapella.gpi.ru
Sh.A. Egamberdiev, acad., Ulughbeg Astronomical Institute, Uzbek Academy of Sciences, Tashkent, Uzbekistan, shuhrat@astrin.uz
B.S. Yuldashev, acad., Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, yuldbekh@gmail.com

Journal is registred by Agency on press and information of Republic of Uzbekistan in 22.12.2006.
Registration number 0045
Typesetting and makeup are made in editorial office of Uzbek Journal of Physics

Passed for printing 15 10.2021. Dimension of paper 60×84$^{1}/_{8}$. Conventional printed sheet 7.0. Calculation publishing sheet 8,75. An edition of 120 copies. Order list №112704
Address of editorial office: Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan, M. Ulugbek region, Dormon street 33, 100125 Tashkent, Uzbekistan
Тел.: 998-71-262-31-82, +998-90-3251531, Fax: 998-71-262-31-83
Printed: OOO «POLYGRAPHIC TECHNOLOGY»,
Tashkent, Катта Миробод, 1-тор, д.18А. Tel. 90 926 25 26.

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

Possible fractional quantum Hall effect and Wigner crystal states in two-dimensional Coulomb gases as a result of anyon correlations

B. Abdullaev[*,1], U. Roessler[2], C.-H. Park[3], M.M. Musakhanov[1]

[1] National University of Uzbekistan, Vuzgorodok, University str. 4, 100176, Tashkent, Uzbekistan
[2] Institute for Theoretical Physics, University of Regensburg, D-93040 Regensburg, Germany
[3] Center for Dielectric and Advanced Matter Physics, Pusan National University, 30 Jangjeon-dong, Geumjeong-gu, Busan 609-735, Republic of Korea

Received 09.03. 2021; revised 03.12.2021

* Corresponding author: e-mail bakhodir.abdullaeff@yandex.ru, Phone: +998 998 741 404, Fax: +998 712 460 224

В нашей недавно опубликованной работе мы вывели приближенную аналитическую формулу для энергии основного состояния (2D) газа из заряженных энионов. Этот результат позволил нам в настоящей работе оценить обменно-корреляционную энергию, которая, как хорошо известно из литературы, является разностью энергии основного состояния и энергии Хартри-Фока для фермионов с энионным параметром ν=1, и сформулировать энионную-корреляционную энергию для остальных ν<1. Минимумы последней для всех фиксированных значений ν, точно также как и минимумы для энергии основного состояния при тех же ν, являются функциями только ν, что означает, что они являются зависимыми только от энионной статистики без влияния эффекта кулоновского взаимодействия. Отсюда мы заключаем, что должна возникнуть локализованная в реальном пространстве макроскопическая структура для любого фиксированного значения ν из ν<1. Так, к примеру, поскольку фактор заполнения уровня Ландау (ФЗУЛ) для квазичастиц дробного квантового эффекта Холла (ДКЭХ) равняется энионному параметру, то эти квазичастицы должны конденсироваться в некоторую структуру в реальном пространстве при данном ФЗУЛ, формируя плато ДЭКХ и показывая, что ДЭКХ является результатом энионных корреляций. С другой стороны, выражая упомянутую выше функцию минимумов по ν через параметр плотности r_s кулоновского газа, мы получаем значения r_s, при которых можно наблюдать 2D вигнеровский кристалл (ВК). Интересно отметить, что одновременное наблюдение в эксперименте ДЭКХ и ВК состояний находится в соответствии с нашим рассмотрением.

Ключевые слова: энион, корреляция, 2D заряженный газ, макроскопическая структура.

Recently, we have derived an approximate analytic formula for the ground state energy of (2D) charged anyon gas. This result allows us in the present paper to estimate the exchange-correlation energy, which is as it is well known from a literature the difference of the ground state energy and the Hartree-Fock energy, for fermions with the anyon parameter ν=1, and to formulate the anyon correlation energy for other ν<1. The minima of the last one for all fixed values of ν as well as the minima of the ground state energy at the same ν are only the ν dependent, which means they are only the anyon statistics dependent with no effect of the Coulomb interaction. From this, we conclude that there should appear the localized real space macroscopic structure for any fixed ν from ν<1. For instance, since the Landau level filling factor (LLFF) of the fractional quantum Hall effect (FQHE) quasi-particles is equal to the

anyon parameter then these quasi-particles should condense in the some real space structure at this LLFF, forming the FQHE plateau and showing that the FQHE is a result of anyon correlations. On the other hand, expressing the above mentioned minima function of ν through the density parameter r_s of the Coulomb gas, we obtain the values of r_s, for which the 2D Wigner crystal (WC) can be observed. It is interesting that the simultaneous observation of the FQHE and WC states in accord with our consideration.

Keywords: anyon, correlation, 2D charged gas, macroscopic structure

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.282

The two-dimensional (2D) gas of electrons or holes of semiconductors, measured at strong external magnetic fields and low temperatures, displays very interesting phenomenon, which calls the fractional quantum Hall effect (FQHE). In this effect *xx* and *xy* components of the semiconductor magneto-resistance exhibit deep minima and plateaus, respectively, at the fixed fractional numerical values of the Landau level filling factor (LLFF) [1]. Three physical factors: inter-particle Coulomb interaction, the strong magnetic field and an external disorder, are crucial for the formation of the FQHE [2, 3]. It was suggested in the reviews [2, 3] that above mentioned plateaus of the FQHE are results of a disorder and impurities in a sample. The effect of localization of the FQHE real space structure as well as of a 2D Wigner crystal (WC) in this disorder was demonstrated in the Ref. [4].

However, as it was demonstrated in the experimental paper, Ref. [1], and in the theoretical work, Ref. [5], these structures are free in the space and not pinned by the disorder and impurities. In the present paper we show that the localization of the FQHE real space structure and of the WC without the disorder and impurities is possible. For the explanation of this effect, we use the finding (see reviews [2, 3] and book [6]) that elementary excitations or quasi-particles, appearing from the system ground state at some fixed fractional values of the LLFF, are responsible for the FQHE, these quasi-particles are anyons, and the anyon factor equals to the LLFF fractional value. More clearly, we demonstrate in the present paper that the ground state energy of 2D Coulomb interacting anyons without magnetic field has a minimum at any fractional value of the LLFF and the physical origin of the FQHE and the WC is in this minimum, while the physical origin of the minimum is in the correlations of these anyons.

Earlier, there were made several attempts to find the FQHE states through the calculation of the ground state energy minima of 2D gas of electrons in the strong magnetic fields at fixed fractional values of the LLFF [7, 8]. In Ref. [8] for the calculation of minima of the same problem, we have used anyons to represent fermions and bosons. Calculations [7, 8] have demonstrated that investigated energy had no minima. While, as it will be shown below, the ground state energy of the FQHE quasi-particles has minimum at any fixed fractional value of the anyon factor or LLFF and this minimum is a result of charged anyon correlations and not of localization and pinning in the disorder or in impurities.

At beginning, we define the correlations of 2D Coulomb interacting anyons. However first, we would like to remember how the correlations for Coulomb interacting electrons are introduced.

The homogeneous electron gas, although it has become the testing ground of quantum mechanical many-body techniques since long time and a result of such calculations can be found in textbooks (see for example [9] and [10]), does still contain yet unexpected puzzles. They are related to the correlation effects caused by the particle-particle interaction, which can be treated so far (or principally) only in approximate ways. Here we would like to draw attention to the 2D systems, which have their prominent realizations in semiconductor heterostructures and layered metallic systems such as the cuprate superconductors. These systems attract much interest from experiment and theory due to the physics related with correlation effects [11-13].

With respect to the ground state energy in fermion systems, the Hartree-Fock (HF) approximation, originally developed for high particle densities, provides the dominating contributions even for intermediate values of the density parameter r_s. Here, r_s is defined as the ratio of the mean distance between particles to the Bohr radius. The difference between the exact ground state energy and its HF value is known as the exchange-correlation energy (see, for example, textbooks [9-11]). For 2D spin-polarized fermions (in this paper we consider only these particles as fer-

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

mions), it has been demonstrated by quantum Monte-Carlo (MC) calculations [14, 15] that the exchange-correlation energy may be considered essentially as a small correction to the HF energy for all values of r_s. To find the exact ground state energy of 2D Coulomb interacting boson system, the MC method [16] was also used.

Typically, all MC methods calculate ground state energies for fixed and discrete values of r_s and then an interpolation of these energies is made to yield their expansion in terms of powers of r_s. For bosons, at small r_s (the high density limit), this interpolation formula reproduces the ground state energy of the 2D Coulomb boson gas (2DCBG) obtained with the hypernetted-chain approximation [17]. The latter result follows also by using the Bogoliubov approximation [18]. For fermions, as we said above, the interpolation formula reproduces the ground state energy close to the HF approximation.

For charged anyon systems, correlations between particles have not a simple relationship with respect to exchange of two particles in the real space as for fermions (see, for example, Refs. [11-13]) due to the fact that the exchange of two particles for anyons involves the coordinates of all particles [6] of system. Therefore, it is better do not call the correlations for charged anyons as the exchange-correlations as for fermions. In this case, we call these physical phenomena as anyon correlations, or just correlations. The physics of these correlations will be clarified below.

Here, we outline the main result of Ref. [19], which allows us to conclude about possibility to appear of FQHE and WC states in the charged anyon system without disorder and impurities. It is in the minimum of the ground state energy in the 2D Coulomb interacting gases at each fixed anyon parameter or LLFF.

In Ref. [19] we have employed the anyon concept in order to find an approximate analytic formula (AAF) for the ground state energy of 2D Coulomb gases per particle, which is capable of accounting for the particle fractional anyon statistics together with bosonic and fermionic limits of this statistics. This formula was derived by using the corresponding result for the harmonically confined 2D Coulomb anyon gas [18] and applying a regularization procedure for vanishing of this confinement. After the regularization procedure our AAF becomes the function of the fractional statistics ν and the Coulomb interaction density r_s parameter, i.e. $\varepsilon_0(\nu,r_s)$. For the fermion limit of anyons (with $\nu=1$) and at very small r_s (the high density limit), $\varepsilon_0(\nu,r_s)$ reproduces the HF energy of spin-polarized 2D electrons (Ref. [20])

$$E_{\mathrm{HF}} = \frac{2}{r_s^2} - \frac{16}{3\pi r_s}. \qquad (1)$$

For the boson limit of anyons (with $\nu = 0$) and at the same high density very small r_s values, $\varepsilon_0(\nu,r_s)$ reproduces the ground state energy of the 2D Coulomb boson gas, 2DCBG, found in Refs. [17, 18] (see above). For very large values of r_s, the ground state energy per particle is insensitive to the statistics of particles and $\varepsilon_0(\nu,r_s)$, derived in Ref. [19], reproduces the energy of the classical 2D electron crystal (the 2D WC [21]).

However, the main property of the function $\varepsilon_0(\nu,r_s)$ is in that it has the fixed value of minimum $\varepsilon_{0,\min}$, the position of which is a function of r_s (at constant ν) and determined by fitting procedure just outlined in the previous paragraph.

For the comparison, we depict in Fig. 1 the exchange-correlation energy as the difference of the ground state energies obtained from the MC calculations [14, 15] and HF values (from Eq. (1)) and the correlation energy as the difference of the ground state energies obtained from the expression $\varepsilon_0(\nu=1,r_s)$ and HF values (from Eq. (1)) for 2D fermions.

Figure 1 shows both correlation energies as a function of r_s and exhibits a pronounced minimum for the correlation energy $\varepsilon_{c,\min}(r_s\cong 0.2)\sim -0.8$ Ry, where Ry is Rydberg energy unit. The origin of this property of $\varepsilon_{c,\min}(r_s)$ is in the two facts (see Ref. [18]). First of all, the position of the minimum ($\varepsilon_{0,\min}$) of the energy $\varepsilon_0(\nu=1,r_s)$ as function of r_s ($r_s\approx 0.7$) is shifted on the left with respect to the one of HF ($r_s\approx 2.36$). And at the second, the value of the former ($\varepsilon_{0,\min}=-1.159$) is lower than the one of the later ($E_{\mathrm{HF,min}} = -0.36$).

The another remarkable property of the ground state energy, $\varepsilon_0(\nu,r_s)$, of the charged anyon gas, obtained from AAF, is in that at all $\nu\le r_s$ and $r_s\le 0.5$ it exhibits the prominent minimum $\varepsilon_{0,\min}(\nu\neq 0, r_s)$ (see the Fig. 2). Furthermore, using the approximate expression

$$\varepsilon_0(\nu,r_s) \approx \frac{c_{\mathrm{WC}}^{2/3} f^{2/3}(\nu,r_s)}{r_s^{4/3}} \left(-1 + \frac{7\nu r_s f^{2/3}(\nu,r_s)}{3c_{\mathrm{WC}}^{4/3} r 4_s^{4/3})} \right) \qquad (2)$$

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

valid for $\nu \le r_s$ and $r_s \to 0$ and for $\nu=1$ and $r_s \to \infty$ limits, one can show that the $\varepsilon_{0,\min}(\nu \neq 0, r_s)$ is only the function of the anyon parameter ν. For this, we minimize Eq. (2) with respect to $f^{2/3}(\nu, r_s)/r_s^{4/3}$ and obtain the expression $\varepsilon_{0,\min}(\nu) = -3c_{WC}^2/(28\nu)$ where c_{WC}= 3.2903 and it should be $\nu \neq 0$.

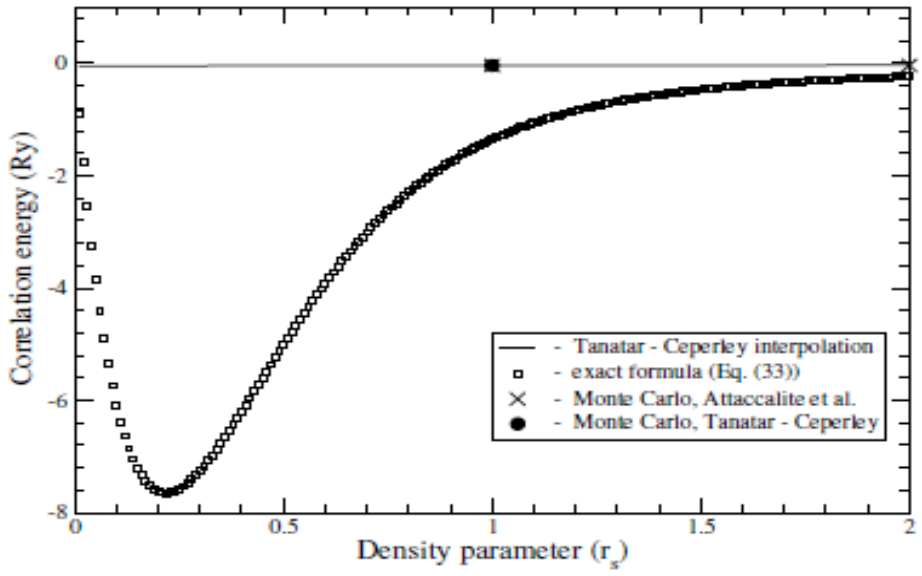


Figure 1. The exchange-correlation energy as the difference of the ground state energies obtained from the MC calculations [14, 15] and HF values (from Eq. (1)) (cross and solid dots, respectively, and their interpolation from Ref. [14] (solid line)) and the correlation energy as the difference of the ground state energies obtained from the expression $\varepsilon_0(\nu=1, r_s)$ and HF values (from Eq. (1)) (open squares) for 2D fermions. In the insert, it is indicated the accurate expression of $\varepsilon_0(\nu, r_s)$ for all values of ν and r_s as "exact formula Eq. (33)" from Ref. [18].

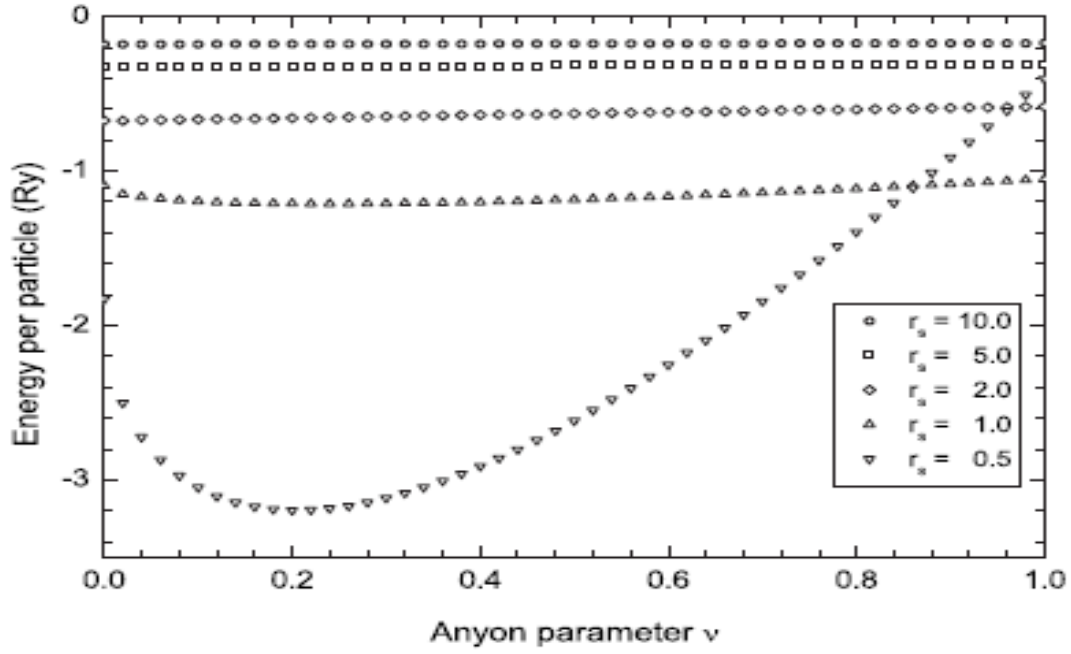


Figure 2. Ground state energies per particle vs anyon parameter ν for various fixed values of r_s. The figure is taken from Ref. [18].

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

For the fermion system (ν = 1) this gives the energy minimum $\varepsilon_{0,\min}(\nu)=-1.159$, which exactly coincides with $\varepsilon_0(\nu=1,r_s\approx0.7)$ (see previous paragraph above and Fig. 2). The curves, depicted in Fig. 2, were calculated using AAF for the ground state energy per particle $\varepsilon_0(\nu,r_s)$, Eq. (33) from the Ref. [18], accurate for all values of ν and r_s. A smooth variation of minimal energies $\varepsilon_{0,\min}(\nu)$ with the decrease of the parameter ν is clearly seen from these curves. This property of the $\varepsilon_{0,\min}(\nu)$ shows that it is inherent for the physics of the charged anyon gas and not an artifact of the theory. On the other hand, the ν parameter dependent minimal energy $\varepsilon_{0,\min}(\nu)$ at ν<1 may be universal for anyon gases with arbitrary interparticle interaction.

There appears the question how to define the anyon correlation energy, if HF energy, Eq. (1), is only the density parameter r_s dependent. The Fig. 2 shows the way for that. Physically, it is clear that the correlation energy should display the changing of energy of an anyon system at the variation of the statistics of particles. Therefore, as HF energy in our case, we can bring the energy $\varepsilon_0(\nu,r_s=1.0)$ = const (see Fig. 2), and the correlation energy can be defined as $\varepsilon_0(\nu,r_s<1.0)-\varepsilon_0(\nu,r_s=1.0)$. Since for all fixed values $r_s\geq1.0$ the function $\varepsilon_0(\nu,r_s\geq1.0)$= const (see the same figure).

In principle, we can bring the asymptotic expression for the ground state energy (see Eq. (38) of the Ref. [18])

$$\varepsilon_0(\nu,r_s\to0)\approx\frac{2f(\nu,r_s)}{r_s^2}\left(\nu^{1/2}-\frac{c_{\mathrm{WC}}r_s}{\nu^{1/4}f^{1/2}(\nu,r_s)}\right) \quad (3)$$

valid for $r_s\to0$ and $\nu\neq0$ with the approximate $f(\nu,r_s)\approx\nu^{1/2}$ for the definition of the HF energy of a charged anyon gas. However, for fermions (ν=1), Eq. (3) gives for the minimum energy $\varepsilon_{0,\min}(\nu=1,r_s\to0)=c_{WC}^2/2$, which is lower than $\varepsilon_{0,\min}(\nu=1)=-3c_{WC}^2/28$ (see above), therefore, it is not applicable here as definition of the HF energy. Because one assumes (see, for example, Refs. [14, 15]) that the true energy should be lower than the HF energy.

The anyon parameter ν dependent minimal energy $\varepsilon_{0,\min}(\nu)$ (at ν<1) gives us the unique opportunity to use it for the possible interpretation of experiments on the FQHE plateaus for fractional values of the LLFF. Indeed, the minimum of the ground state energy $\varepsilon_0(\nu,r_s)$ lower than for the boson ground state energy (see Fig. 2), presumes the transition of a system into this state with formation of the real space localized macroscopic structure. It is proven in Refs. [2, 3, 6] that the LLFF of the FQHE plateau is equal to the anyon parameter ν. Therefore, one can expect the existence of the above structure, which forms the FQHE plateau in the electric resistivity or conductivity, for each fixed value of LLFF or ν<1. An analysis, given just above in this paper, gives us a background to consider that the FQHE is a result of (anyon) correlations and not of the Coulomb interaction. Furthermore, one can assume that the FQHE state may be observed in any system with anyon statistics.

The minimal energy $\varepsilon_{0,\min}(\nu)$ (at ν<1) can be expressed as function of the density parameter r_s of the 2D Coulomb gas. This formula can be derived minimizing Eq. (2) for the $\varepsilon_0(\nu,r_s)$ with respect to r_s. To calculate this we use the approximate $f(\nu,r_s\to0)\approx\nu^{1/2}b_1$. In Ref. [18], we motivate the inclusion of the $\nu^{1/2}$ dependence in $f(\nu,r_s)$ by the linear ν dependence of the ground state energy for the anyon gas without Coulomb interaction and close to bosonic limit (ν=0) found in [22] and [23]. This linear dependence of the energy on ν is also reproduced in Eq. (3).

A minimization of Eq. (2) with $f(\nu,r_s\to0)\approx\nu^{1/2}b_1$ over the r_s gives (see also Ref. [18]) $\varepsilon_{0,\min}=-(4/5)b_2^{1/4}c_{WC}b_1^{1/2}/r_s$, which occurs at position $\nu_0=b_2^{3/4}c_{WC}r_s/b_1^{1/2}$, where b_1=1 and b_2=3/35. For r_s=0.2 this provides $\varepsilon_{0,\min}=-8.689$ and $\nu_0\approx0.08$, while from AAF expression $\varepsilon_0(\nu,r_s)$ we have $\varepsilon_{0,\min}=-8.847$ and $\nu_0\approx0.08$. Comparing the asymptotic formula $\varepsilon_{0,\min}\sim1/r_s$ with the ground state energy expression $\varepsilon_0(\nu=0,r_s\to0)=-c_{BG}r_s^{-2/3}$ of the 2DCBG, where $c_{BG}=1.29355$, derived in Refs. [17, 18], it is evident that at $r_s\to0$ the charged anyon gas ground state has lower energy than one of the charged bosons.

If we look on Fig. 2, we see the appearance of minimums $\varepsilon_{0,\min}$ for each fixed density r_s from $r_s\leq0.5$ range. This takes place since mentioned density r_s corresponds to the fixed anyon parameter ν_0, at which $\varepsilon_{0,\min}(\nu)$ occurs. The idea, used for the observation of the FQHE plateaus within the present treatment, can be applied for the observation of the WC also. This occurs because the localized macroscopic structure of charged particles in the form of the WC may be condensed in the $\varepsilon_{0,\min}$ minimum of the energy. It is

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

interesting, the simultaneous coexistence of FQHE and WC states was observed in Ref. [4].

One can estimate the applicability of our treatment for the case of the experiment [4]. The experiment observed the FQHE plateau and WC structures at $r_s \approx 30$. This paper defines the parameter r_s as $r_s = m^* e^2 / (4\pi\delta\hbar^2\sqrt{\pi\rho})$, where m^* and e are the effective mass and charge of a hole, respectively, δ is the dielectric constant of a sample, and ρ is the density of holes. In our consideration, all parameters in the definition of r_s are unchanged except the charge of a hole e. As we said above, the FQHE is the system with a charge νe [6], i.e. the system of FQHE quasi-particles. Therefore, in fact, the parameter r_s should be redefined with the factor ν^2. Thus instead of $r_s \approx 30$ in experiment, we need to say about $r_s \approx \nu^2 30$ and to have a value of r_s from the range $r_s < 1.0$ there should be the value $\nu \approx 0.2$. In the Fig. 2, the case with $\nu \approx 0.2$ corresponds to the minimum of the ground state energy for $r_s = 0.5$. Therefore, in fact, the experiment, Ref. [4], sees $r_s = 0.5$.

In conclusion, in the frame of our phenomenological approach based on the anyon concept, we have identified exchange-correlation and anyon correlation effects in the high density limit of the 2D Coulomb anyon gas. In contrast with results from MC calculations for fermions, our data for the charged anyon gas show a pronounced minimum in the ground state and correlation energies, which were ascribed to the anyon correlations. We used this result with minimum of both energies for the possible observation of FQHE and WC states, in which the role of anyon statistics is crucial, and find agreement with the experiment.

Acknowledgment. The work was performed with the partial support from the National Research Foundation of Korea, Grants No. 2015M3D1A107060922 funded by the Korean Government. B. A. acknowledges the hospitality at the National University of Pusan, the Republic of Korea. B. A. also acknowledges the National Grant OT-Ф2-10 “Nonlinear, Many-Particle, Quantum and Classical Systems” of the Government of the Republic of Uzbekistan.

References

[1] Yoon Jang Chung, K.A. Villegas-Rosales, K.W. Baldwin, Nature Partner Journals Quantum Mater. **20**, 632 (2021).
[2] David Tong. The quantum hall effect. TIFR infosys lectures, arXiv: 1606.06687.
[3] D.E. Feldman, B.I. Halperin. arXiv: 2102.08998.
[4] G.A. Csáthy, Hwayong Noh, D.C. Tsui, L.N. Pfeiffer, and K.W. West. Phys. Rev. Lett. **94**, 226802 (2005).
[5] K.-S. Kim, S.A. Kivelson. Nature Partner Journals Quantum Mater. **6**, 22 (2021).
[6] A. Lerda, Anyons. Quantum mechanics of particles with fractional statistics (Springer-Veglag, Berlin, 1992).
[7] D. Levesque, J.J. Weis, and A.H. MacDonald. Phys. Rev. B **30**, 1056 (1984); G. Fano and F. Ortolani. Phys. Rev. B **37**, 8179 (1988); D. Yoshioka. Phys. Rev. B **29**, 6833 (1984).
[8] B. Abdullaev, U. Rössler, C.-H. Park, and M. Musakhanov. Bull. Nat. Univ. Uzb. Nat. and Math. Sci. **3**, 412 (2020).
[9] Ch. Kittel. Quantum Theory of Solids (J. Wiley & Sons, New York, 1963).
[10] N.M. March, W.H. Young, and S. Sampanthar. The many body problems in quantum mechanics (Univ. Press, Cambridge, 1967).
[11] G.F. Giuliani and G. Vignale. Quantum Theory of the Electron Liquid (Cambridge U. Press, New York, 2005).
[12] M. Seidl. Phys. Rev. B **70**, 073101 (2004).
[13] S.A. Kivelson, I.P. Bindloss, E. Fradkin, V. Oganesyan, J.M. Tranquada, A. Kapitulnik, and C. Howald. Rev. Mod. Phys. **75**, 1201 (2003).
[14] B. Tanatar and D.M. Ceperley. Phys. Rev. B **39**, 5005 (1989).
[15] C. Attaccalite, S. Moroni, P. Gori-Giorgi, and G.B. Bachelet, Phys. Rev. Lett. **88**, 256601 (2002); Erratum ibid **91**, 109902 (2003).
[16] S. De Palo, S. Ponti, and S. Moroni. Phys. Rev. B **69**, 035109 (2004).
[17] V. Apaja, J. Halinen, V. Halonen, E. Krotscheck, and M. Saarela. Phys. Rev. B **55**, 12925 (1997).
[18] B. Abdullaev, U. Rössler, and M. Musakhanov. Phys. Rev. B **76**, 075403 (2007).
[19] B. Abdullaev, G. Ortiz, U. Rössler, M. Musakhanov, and A. Nakamura. Phys. Rev. B **68**, 165105 (2003).
[20] A.K. Rajagopal and J.C. Kimball. Phys. Rev. B **15**, 2819 (1977).
[21] L. Bonsal and A.A. Maradudin. Phys. Rev. B **15**, 1959 (1977).
[22] D. Sen and R. Chitra. Phys. Rev. B **45**, 881 (1992).
[23] X.G. Wen and A. Zee. Phys. Rev. B **41**, 240 (1990).

Икки-ўлчамли кулон газлар ичида энион корреляциалар натижасида ҳосил бўладиган фракцияли Холл квант эффекти ва Вигнер кристалл ҳолатларнинг мумкинлиги

Б. Абдуллаев[1], У. Роесслер[2], Ч.-Х. Парк[3], М.М. Мусаханов[1]

[1]Ўзбекистон Миллий Университети, Вузгородок, Университет кўч. 4, 100176, Тошкент, Ўзбекистон
[2] Institute for Theoretical Physics, University of Regensburg, D-93040 Regensburg, Germany;
[3] Center for Dielectric and Advanced Matter Physics, Pusan National University, 30 Jangjeon-dong, Geumjeong-gu, Busan 609-735, Republic of Korea

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

Биз яқинда чоп этилган мақоламизда, (2D) зарядланган эниoнлар гази учун асосий ҳолат энергиясининг аналитик аппроксимация формуласини чиқара олдик. Бу мақоламизда биз олинган натижаларни ишлатиб, энион параметри ν=1 чегарасида ифода бўладиган фермионлар учун алмашиш-корреляцион энергиясини баҳолашга муясар бўлдик ва қолган ν<1 параметрлар учун энион-корреляцион энергиясини аниқлаш йулини ифодаладик. Алмашиш-корреляцион энергияси асосий ҳолат энергиясидан Хартри-Фок энергиясини фарқига тенглиги адабиетда яхши езиб этилган. Хамма фиксация қилинган ν да энион-корреляцион энергия-сининг минимумлари асосий ҳолат энергиясини минимумларига мос бўлиб фақат ν лар функция-силигини аниқлади. Демак бу минимумлар фақат эниoнлар статистикаси билан боғлиқ бўлиб кулон таъсири эффектидан ироқ экан. Бу аргументлар қуйидаги хулосага келтиради. ν < 1 соҳасидан олинган ихтиерий фиксация қилинган ν миқдорида реал фазасида макроскопик структура ҳосил бўлиши лозим. Мисол учун қасрли Холл квант эффекти (ҚХКЭ) квазизарраларнинг Ландау сатқининг тўлдириш фактори (ЛСТФ) энион параметрига тенглиги сабабли берилган ЛСТФ миқдорида ҚХКЭнинг платосини ҳосил қилиб, бу квазизарралар реал фазасида қандайдир структурасига конденсатланиши лозим. Бу мулохоза ҚХКЭ ҳолати анионлар корреляцияси натижасида пайдо бўлишини кўрсатади. Бошқа тарафдан қаралганда юқорида эслатган ν минимумлар функциясини кулон газнинг зичлик параметри r_s орқали ифодаласак 2D Вигнер кристаллни (ВК) экспериментда кузатиладиган r_s зичликни аниқласа бўлади. Шуни айтиб ўтиш қизиқарлики, бир вақтда экспериментда ҚХКЭ ва ВК лар ҳолатларини кузатилиши бизнинг назариямиз билан мос.

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

Effective triaxiality of even-even nuclei with quadrupole and octupole deformations

M.S. Nadirbekov*, O.A. Bozarov

Institute of Nuclear Physics, Academy of Sciences of Uzbekistan, Mirzo Ulugbek district, Ulugbek township, Khorasan 1, 100214, Tashkent, Uzbekistan

Получена 21 12.2021.

* Corresponding author: e-mail nodirbekov@inp.uz, Phone: +998 97 470 32 60

Развита неадиабатическая коллективная модель тяжелых неаксиальных четно-четных ядер с квадрупольной и октупольной деформациями. Поперечные квадрупольные и октупольные колебания поверхности ядра учитываются эффективно, а продольные колебания учитываются динамически. На основе предложенной модели получено аналитическое выражение для энергии уровней коллективных состояний, содержащее пять подгоночных параметров. Эти параметры определяются из сравнения теоретических и экспериментальных данных. Угловая часть полярных координат использована в качестве параметра для равновесного положения четно-четного ядра. Получено хорошее описание коллективных состояний yrast-полос переменной четности тяжелых неаксиальных четно-четных ядер: ^{150}Nd, ^{152,154}Sm, ^{172}Yb, ^{228,230,232}Th, ^{232,234,236,238}U и ^{240}Pu.

Ключевые слова: неадиабатическая коллективная модель, квадрупольные и октупольные деформации, неаксиальность, yrast-полоса.

A nonadiabatic collective model of nonaxial even-even nuclei with quadrupole and octupole deformations is developed. Transverse quadrupole and octupole deformations are taken into account effectively. And longitudinal deformations are taken into account dynamically. On the basis of the proposed model, an analytical expression for the level energy is obtained containing five adjustable parameters, which are determined from a comparison of theoretical and experimental data. The angular part of the polar coordinates is used as a parameter of an equilibrium state of an even-even nucleus. A good description of the collective states of the yrast-band with alternating parity of heavy nonaxial even-even nuclei ^{150}Nd, ^{152,154}Sm, ^{172}Yb, ^{228,230,232}Th, ^{232,234,236,238}U and ^{240}Pu is obtained.

Keywords: nonadiabatic collective model, quadrupole and octupole deformations, nonaxiality, yrast-band.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.283

I. Introduction

Most of the atomic nuclei are deformed in the ground state. The charactheristics of most deformed nuclei have revealed that they have axially symmetric prolate or oblate shapes. However, atomic nuclei have a stronger tendency to deform into prolate shapes than into oblate ones [1, 2]. In Ref. [3] a systematic study of even-even nuclei was performed within relativistic mean field theory with axial deformation. The ground state properties of about 2000 even-even nuclei from $Z = 8$ to $Z = 120$ have been studied and all possible deformations of each nuclide have been examined. The possible appearance of deformation beyond the axial kind, such as triaxial or even higher order multipole deformations have been suggested.

The fundamental properties of the nuclear shape are expressed by the parameter quadrupole deforma-

tion β_2 and asymmetry parameter γ [4]. The parameter β_2 is related to the intrinsic quadrupole moment and describes the magnitude of departure from the spherical shape along given axis. At $\gamma = 0$ and $\gamma=\pi/3$ it corresponds to the axially symmetric prolate and oblate shapes, respectively. The intermediate values of γ, within $0<\gamma<\pi/3$, give the triaxial shapes [4-6].

The collective spectra of atomic nuclei with axial symmetry quadrupole and octupole deformations ($\gamma=0$, $\eta=0$, and $K=0$, and β_2, β_3 are free dynamical variables) are characterized by rotational bands with alternating parity [7-14]. In Ref. [14] the yrast- and non-yrast bands with alternating parity of deformed axial even-even nuclei within a collective model with nonadiabatically coupled quadrupole and octupole degrees of freedom were described. The structure of the yrast- and first non-yrast alternating parity sequences in the rare-earth nuclei ^{150}Nd, ^{152,154}Sm, ^{154}Gd, ^{156}Dy, ^{162,164}Er and the actinides ^{232,234,236,238}U were reproduced satisfactorily. Where the hamiltonian of the axial-symmetry even-even nuclei has an exact $I(I+1)$ dependence and the observed or estimated deviations from such a simple energy dependence is actual task. It should be noted that in the experiments [15] one can observe energy bands, which cannot be explained within the framework of the nuclei models with axially symmetric multipole deformations [8-14], for example, the spectrum of γ-band energy levels [16, 17].

In Ref. [18] the approach triaxial rotator model (in the case K-mixing, K are the projections of the angular momentum on the third axes of the intrinsic frames) was used for description energy levels with alternating parity of even-even nuclei: ^{228,230,232}Th, ^{230,232,234,236,238}U and ^{240}Pu with triaxial quadrupole and octupole deformations (γ-, η-deformations), in the region actinides. In this consideration the deformation parameters are constants whose values $\beta_{2\text{eff}}$, γ_{eff}, $\beta_{3\text{eff}}$ and η_{eff} effectively determine a rigid triaxial rotor. Therefore, the purpose of the present work is to develop the model of atomic nuclei with triaxial-quadrupole and octupole deformations, i.e. β_2, β_3 are free dynamical variables, and $\gamma=\gamma_{\text{eff}}$, $\eta=\eta_{\text{eff}}$ and $K=0$. This model allows one to describe other energy bands observed in experiments with heavy ions [15]. As it will be seen below the implemented analysis allows us to make a conclusion about the relevance of the applied model formalism.

II. Model of axial quadrupole-octupole vibrations and triaxial rotations

The general theory of quadrupole and octupole excitation of even-even nuclei is determined by the Hamilton operator, which contains seven dynamical variables: deformation parameter β_2 ($\beta_2\geq0$) and asymmetry parameter γ ($0\leq\gamma\leq\pi/3$) of the quadrupole oscillations; deformation parameter β_3 ($\beta_3\geq0$) and asymmetry parameter η ($0\leq\eta\leq\pi/2$) of the octupole oscillations; Eulerian angles θ_1 ($0\leq\theta_1\leq2\pi$), θ_2 ($0\leq\theta_2\leq\pi$), θ_3 ($0\leq\theta_3\leq2\pi$) are determine rotation of the nucleus relative to the laboratory system [18]:

$$\hat{H} = \hat{T}_{\beta_2} + \hat{T}_{\beta_3} + \hat{T}_{\gamma} + \hat{T}_{\eta} + T_{rot} + V(\beta_2,\beta_3,\gamma,\eta), \quad (1)$$

where

$$\hat{T}_{\beta_2} = -\frac{\hbar^2}{2B_2}\frac{1}{\beta_2^4}\frac{\partial}{\partial\beta_2}\left(\beta_2^4\frac{\partial}{\partial\beta_2}\right), \quad (2)$$

$$\hat{T}_{\beta_3} = -\frac{\hbar^2}{2B_3}\frac{1}{\beta_3^4}\frac{\partial}{\partial\beta_3}\left(\beta_3^4\frac{\partial}{\partial\beta_3}\right), \quad (3)$$

$$\hat{T}_{\gamma} = -\frac{\hbar^2}{2B_2}\frac{1}{\beta_2^2\sin(3\gamma)}\frac{\partial}{\partial\gamma}\left(\sin(3\gamma)\frac{\partial}{\partial\gamma}\right), \quad (4)$$

$$\hat{T}_{\eta} = -\frac{\hbar^2}{2B_3}\frac{1}{\beta_3^2\sin(3\eta)}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\sin(3\eta)\frac{\partial}{\partial\eta}\right). \quad (5)$$

Expressions (2), (3), (4) and (5) are kinetic energy of operators β_2, β_3, γ and η vibrations, respectively; $V(\beta_2, \beta_3, \gamma, \eta)$ – potential energy of above mentioned vibrations and

$$\hat{T}_{rot} = \sum_{\lambda=1}^{3}\frac{\hbar^2\hat{I}_i^2}{J_i} \quad (6)$$

is the rotational energy operator, here I_i (i=1,2,3) are the components of the angular momentum operator. J_i are the components of the quadrupole and octupole moment of inertia. In the general case, they depend on the parameters of the mass and the quadrupole and octupole deformations B_2, β_2, γ and B_3, β_3, η, respectively. General solution of Schrodinger equation with hamiltonian (1) is a very complicated. Therefore different simplifications are used. One such model is the analog of Davydov-Chaban model [16, 17], where variables γ and η are replaced by their effective values γ_{eff} and η_{eff}. Then, the hamiltonian (1) takes the following form:

$$\hat{H}_{total} = \hat{T}_{\beta_2} + \hat{T}_{\beta_3} + \hat{T}_{rot} + V(\beta_2,\beta_3), \quad (7)$$

where $\hat{T}_{\beta_2}$ and $\hat{T}_{\beta_3}$ are determined by equations (2) and (3).

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

In this case rotational energy operator (6) depends on the effective values γ_{eff} and η_{eff}.

Now we will write Schrodinger equation with hamiltonian (7):

$$-\frac{\hbar^2}{2B_2}\left[\frac{3}{\beta_2}\frac{\partial}{\partial\beta_2}+\frac{\partial^2}{\partial\beta_2^2}\right]\Psi_I^{\pm}(\beta_2,\beta_3,\theta)- \\ -\frac{\hbar^2}{2B_3}\left[\frac{3}{\beta_3}\frac{\partial}{\partial\beta_3}+\frac{\partial^2}{\partial\beta_3^2}\right]\Psi_I^{\pm}(\beta_2,\beta_3,\theta)+\left[\hat{T}_{rot}+\cdot\right. \\ \left.+V(\beta_2,\beta_3)\Psi_I^{\pm}(\beta_2,\beta_3,\theta)\right]=E_I^{\pm}\Psi_I^{\pm}(\beta_2,\beta_3,\theta). \quad (8)$$

We go to polar coordinates σ ($0\le\sigma\le\infty$) and ε ($-\pi/2\le\varepsilon\le\pi/2$).

$$\beta_2=\sqrt{\frac{B}{B_2}}\sigma\cos\varepsilon,\ \beta_3=\sqrt{\frac{B}{B_3}}\sigma\sin\varepsilon,\ B=\frac{B_2+B_3}{2}. \quad (9)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2B}\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2}+\frac{1}{\sigma}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}+\frac{1}{\sigma^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\varepsilon^2}\right]+ \\ +\left[\hat{T}_{rot}+V(\sigma,\varepsilon)-\xi^{\pm}\right]\Psi_I^{\pm}(\sigma,\varepsilon,\theta)=0. \quad (10)$$

The solution to equation (9) is very difficult. Therefore, further we assume, that

$$\hat{T}_{rot}=\frac{\hbar^2}{2B\sigma^2}\hat{H}_a. \quad (11)$$

Here

$$\hat{H}_a=I_1^2/J_1^2+I_2^2/J_2^2+I_3^2/J_3^2, \quad (12)$$

$$J_1=\cos^2(\varepsilon)\sin^2(\gamma_{eff}-\frac{2\pi}{3})+\sin^2(\varepsilon)\left[\frac{3}{2}\cos^2\eta_{eff}+\sin^2\eta_{eff}+\frac{\sqrt{15}}{2}\sin\eta_{eff}\cos\eta_{eff}\right], \quad (13)$$

$$J_2=\cos^2(\varepsilon)\sin^2(\gamma_{eff}-\frac{4\pi}{3})+\sin^2(\varepsilon)\left[\frac{3}{2}\cos^2\eta_{eff}+\sin^2\eta_{eff}+\frac{\sqrt{15}}{2}\sin\eta_{eff}\cos\eta_{eff}\right], \quad (14)$$

$$J_3=\cos^2(\varepsilon)\sin^2(\gamma_{eff})+\sin^2(\varepsilon)\sin^2\eta_{eff}. \quad (15)$$

We then consider the collective rotational motion of the nucleus separately from the other degrees of freedom. If no further assumptions (e.g. axial symmetry) are imposed, the corresponding energy spectrum is described by the triaxial-rotor Hamiltonian (12). Taking into account the expressions (13), (14) and (15) for J_i, where J_i explicitly depend on the effective values of the quadrupole and octupole deformation parameters γ_{eff}, η_{eff} and ε. As a first approximation, we can use the effective value of this variable, i.e. ε_{eff}.

Thus, implying

$$\Psi_I^{\pm}(\sigma,\theta)=F_I^{\pm}(\sigma)\Phi_{I\tau}^{\pm}(\theta), \quad (16)$$

and using rigid rotor approximation, we rewrite Eq. (8) as in Ref. [16]

$$\left[\hat{H}_a-\xi_{I\tau}^{\pm}\right]\Phi_{I\tau}^{\pm}(\theta)=0, \quad (17)$$

where I_τ – energy of triaxial rotor [18-20] (see next section). We will write Schrodinger equation with hamiltomian in polar coordinates and by taking into account $\varepsilon=\varepsilon_{\text{eff}}$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2B}\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2}+\frac{1}{\sigma}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\right]+\left[\frac{\hbar^2\xi_I^{\pm}}{4B\sigma^2}+V(\sigma)-E_I^{\pm}\right]\right\}F_I^{\pm}(\sigma)=0. \quad (18)$$

III. Solution for the triaxial quadrupole-octupole rotor

In the present work we consider the deformation parameters as constants whose values γ_{eff}, η_{eff}, ε_{eff} effectively determine a rigid triaxial rotor [6, 15, 16]. Thus, we obtain the quadrupole-octupole moment of inertia in a form depending on three arguments $J_i = J_i(\gamma_{\text{eff}}, \eta_{\text{eff}}, \varepsilon_{\text{eff}})$. We take these arguments, γ_{eff}, η_{eff}, ε_{eff} as adjustable parameters. By introducing the reciprocal inertia factors $A_i(\gamma_{\text{eff}}, \eta_{\text{eff}}, \varepsilon_{\text{eff}})=1/[2J_i(\gamma_{\text{eff}}, \eta_{\text{eff}}, \varepsilon_{\text{eff}})]$ (i=1,2,3) we get the Hamiltonian (6) in the form

$$\hat{H}_a=\sum_{i=1}^{3}\hbar^2A_i(\gamma_{eff},\eta_{eff},\varepsilon_{eff})\hat{I}_i^2 \quad (19)$$

depending on the three parameters γ_{eff}, η_{eff}, ε_{eff}. The energy spectrum of the above determined triaxial quadrupole-octupole rotor is obtained by diagonalizing the Hamiltonian (6) on the basis of the symmetrized rotor functions with built-in parity [19]

$$\left|IMK,\pm\right>=\sqrt{\frac{1}{2(1+\sigma_{Ko})}}\left\langle IMK\left|\pm(-1)^I\right|IM-K\right\rangle, \quad (20)$$

where $\left|IMK\right>=\sqrt{\frac{2I+1}{8\pi^2}}D_{MK}^{I}(\theta)$ and M and K are the

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

projections of the angular momentum $\hat{I}$ on the third axes of the laboratory and intrinsic frames, respectively. The eigenfunctions are obtained in the form

$$\Phi^{\pm}_{IM\tau}(\theta) = \sum_{K\geq 0}^{I} C^{\tau}_{IK} \left| IMK, \pm \right> . \qquad (21)$$

The expansion coefficients implicitly depend on the effective mass and deformation parameters $C^{\tau}_{IK} = C^{\tau}_{IK}(\gamma_{eff}, \eta_{eff}, \varepsilon_{eff})$.

For given angular momentum I the quantum number τ = 0, 1, 2,… (limited by $K \leq I$) labels the different eigenvalues $E_{\tau}(I)$ of $\hat{H}_a$ in ascending order.

We obtain the matrix elements of Hamiltonian (6) between basis states (22) with different K values in the following general form:

$$\begin{aligned}\left\langle IMK' \pm \left| \hat{H}_a \right| IMK \pm \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{(1+\delta_{K',0})(1+\delta_{K,0})}} \Big\{ \frac{1}{2} \Big[(A_1 + A_2) I(I+1) - (A_1 + A_2 - 2A_3) K^2 \Big] \times \\ \times \Big[\delta_{K',K} \pm (-1)^{I-K} \delta_{K',-K} \Big] + (A_1 - A_2) f(I,K) \Big[\delta_{K',K+2} \pm (-1)^{I-K} \delta_{K',-\mathrm{K}-2} \Big] + \\ + (A_1 - A_2) f(I,-K) \Big[\delta_{K',K-2} \pm (-1)^{I-K} \delta_{K',-K+2} \Big] \Big\}\end{aligned} \qquad (22)$$

with

$$f(I,K) = \frac{1}{4} \sqrt{(I+K+2)(I+K+1)(I-K-1)(I-K)} . \qquad (23)$$

Since K, $K' \geq 0$ in (22), one has $\delta_{K',-K} \neq 0$ only for $K = 0$, $\delta_{K',-K+2} \neq 0$ only for $K = 0$, 1, 2, while $\delta_{K',-K-2}$ is always zero. As a result Eq. (22) can be written in a simpler form

$$\begin{aligned}\left\langle IMK' \pm \left| \hat{H}_a \right| IMK \pm \right\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{(1+\delta_{K',0})(1+\delta_{K,0})}} \Big\{ \Big[(A_1 + A_2) I(I+1) - (A_1 + A_2 - 2A_3) K^2 \Big] \times \\ \times \Big[\delta_{K',K} \pm (-1)^{I-K} \delta_{K',-K} \Big] + 2(A_1 - A_2) \Big[f(I,K) \delta_{K',K+2} + f(I,-K) \delta_{K',\mathrm{K}-2} \pm (-1)^{I-K} \delta_{K',-K+2} \Big] \Big\}\end{aligned} . \qquad (24)$$

Here we make the following important assumptions originally imposed in [13[:

(i) The quantum number K takes only even values (see also [12, 20]). Then in (21) the sum over K runs from 0 to I in steps of 2.

(ii) The (+) and (−) phases in (21) and (20), which correspond to the A and B_1 classes of the rotation group D_2, are attributed to the positive and negative parity states, respectively.

Because of (i), the phase factor $(-1)^K = 1$ can be omitted in the matrix element expressions (22) and (24). According to (ii) one can write $\Phi^{\pm}_{IM\tau}(\theta) \equiv \Phi^{\pi}_{IM\tau}(\theta)$ and $\left| IMK, \pm \right> \equiv \left| IMK\pi \right> \equiv$ in (21) and (20), respectively, where $\pi = \pm$ is the parity of the rotation state. Also, according to (20) the $\pi = (+)$ parity corresponds to I = even angular momentum states and $\pi = (-)$ corresponds to I = odd ones, as in the usual alternating-parity (octupole) bands. Therefore, one has $\pi = (-1)^I$. Then the (±) and phase factors in (22) and (24) can be omitted when alternating-parity bands are considered. As a result the matrix element (24) reads as

$$\begin{aligned}\left\langle IMK'\pi \left| \hat{H}_a \right| IMK\pi \right\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{(1+\delta_{K',0})(1+\delta_{K,0})}} \Big\{ \Big[(A_1 + A_2) I(I+1) - (A_1 + A_2 - 2A_3) K^2 \Big] \times \\ \times \Big[\delta_{K',K} + \delta_{K',-K} \Big] + 2(A_1 - A_2) \Big[f(I,K) \delta_{K',K+2} + f(I,-K) \Big[\delta_{K',K-2} + \delta_{K',-K+2} \Big] \Big] \Big\}\end{aligned} . \qquad (25)$$

Note that the right hand side of (25) does not include π explicitly, whereas as mentioned above, it is implied by the value of I (even or odd). The lowest eigenvalues $E^{\tau=0}(I)$ and eigenfunctions $\Phi^{\pi}_{IM(\tau=0)}$ of the Hamiltonian correspond to the ground-state-band for I =even, and to the lowest negative-parity band for I =odd. In the same way the higher eigenfunctions/eigenvalues with τ=1, 2, ... determine higher

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

sets of positive- and negative-parity bands. In this work we only consider the lowest (yrast) band structure with $\tau = 0$.

IV. Radial Schrodinger equation

For defined solution (18) potential $V(\sigma)$ can offer

$$V(\sigma) = V_0(\frac{\sigma}{\sigma_0} + \frac{\sigma_0}{\sigma})^2, \quad (26)$$

where V_0 is potential energy in ground state. We bring in designation

$$x = \frac{2BV_0}{\hbar\sigma_0}\sigma^2. \quad (27)$$

Then we obtained following equation

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} + \frac{1}{x}\frac{\partial}{\partial x} - \frac{s^2}{x^2} + \frac{E_I^{\pm}}{x}\right]F_I^{\pm}(\sigma) = 0 \quad (28)$$

and taking into account boundary conditions for Schrodinger equations we obtain

$$\left[x\frac{\partial}{\partial x} + (2s - 1 - x)\frac{\partial}{\partial x} + E_I^{\pm} - s - 1/2\right]F_I^{\pm}(x) = 0, \quad (29)$$

$$s = \sqrt{\frac{\epsilon_{I\tau}}{8} + \frac{1}{\mu^4}}$$

where μ is nonadiabatic parameter [16] and

$$\mu^4 = \frac{\hbar^2}{2BV_0\sigma_0^2}.$$

The eigenfunctions

$$F_I^{\pm}(x) = N_\sigma x^8 \exp^8 F(-n, 2s+1, x),$$

N_σ is normalization coefficient, $F(-n, 2s+1, x)$ is confluent hypergeometric function, n = 0, 1, 2, ... are quantum number of σ-vibrations, where for n=0 the energy levels correspond to yrast-band, and for n=1 the energy levels correspond to first non-yrast-band, etc.

The eigenvalues

$$E_I^{\pm} = \left[2n + 1 + \sqrt{\frac{\epsilon_{I\tau}}{8} + \frac{1}{\mu^4}}\right]\frac{V_0}{\mu^2} - 2V_0. \quad (30)$$

Energy levels in ground state:

$$E_{001}^{+} = \left[1 + \frac{1}{\mu^2}\right]\frac{V_0}{\mu^2} - 2V_0.$$

Energy of the excited states is defined by following expression

$$E_{In\tau}^{\pm} = \left[2n + \sqrt{\frac{\epsilon_{I\tau}}{8} + \frac{1}{\mu^4}} - \frac{1}{\mu^2}\right]\frac{V_0}{\mu^2}. \quad (31)$$

Introduced following quantity $\hbar\omega_0 = V_0/\mu^2$ is energy factor [11, 14]. Then Eq. (31) can be written as

$$E_{In\tau}^{\pm} = \left[2n + \sqrt{\frac{\varepsilon_{I\tau}}{8} + \frac{1}{\mu^4}} - \frac{1}{\mu^2}\right]\hbar\omega_0. \quad (32)$$

In the presented approximation, the following fitting parameters are used: $\hbar\omega_0$ (in keV), γ_{eff} (in degrees), η_{eff} (in degrees) and ε_{eff} (in degrees) and μ (dimensionless).

In general, the ranges of triaxiality parameters are $0° < \eta_{eff} < 90°$, $0° < \gamma_{eff} < 60°$ and $-90° < \varepsilon_{eff} < 90°$.

Many approaches exist for calculating the asymmetry parameter γ_{eff} from experimental observables such as $R_{4/2}=E_{4+}/E_{2+}$ and $B(E_2)$. Davydov and Filippov [6] used this ratio to determine γ_{eff}, as well as Varshni and Bose estimated γ_{eff} by using the ratio $R_{4/2}$ [5]. And the calculation of γ_{eff} from $B(E_2)$ values leads to ambiguous values of γ_{eff} and more reliable values are expected from the level energies [5]. But an estimation of asymmetry parameters of quadrupole and octupole deformations η_{eff} and γ_{eff} was not carried out. The same attempt was made in Ref. [22], where the experimental data for negative parity states in ^{228}Th and ^{232,234}U has been compared with the predictions of three possible asymmetric rotor models: pure quadrupole, pure octupole and mixed-quadrupole/octupole.

A simple estimation of the influence of γ-deformation mode can be done by assuming small variations of the system around $\gamma = 0$, as in the case of the $X(5)$ model [23]. In Ref. [9], the possible ways of the influence of the γ-deformation mode on the collective motion can be estimated in the β_2-β_3 space. Further in this work, the possibility of taking into account the triaxiality of the octupole degree of freedom is noted. In present work we effectively take into account triaxiality of the quadrupole and octupole degrees of freedom, i.e. we use quantities γ_{eff} and η_{eff} as adjustable parameters. This is developed of our work for dynamical β_2 and β_3 variables [18], where the possibility description of the yrast positive- and negative-parity excitations of deformed even-even nuclei through a collective rotation model is given in which the nuclear surface is characterized with effective triaxial-quadrupole and octupole deformations.

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

V. Results

The obtained values of the parameters: ω_σ, γ_{eff}, η_{eff}, ε_{eff}, μ as well as the root-mean-square (RMS) deviations of the energy levels (in keV) between theory and experiment are given in the captions of Figs. [1-12] for all considered even-even nuclei: ^{154,160}Gd, ^{154}Sm, ^{156}Dy, ^{228,230,232}Th, ^{230,232,236,238}U and ^{240}Pu. In these figures (left plots) are presented a comparison of the theoretical and experimental ener gy levels of the yrast-band. The theoretical results are obtained by (31) with n=0. The behaviour theoretical energy levels of the yrast-band are presented for all nuclei is in a good agreement with experimental data.

In present work fitting parameters ω_σ, γ_{eff}, η_{eff}, ε_{eff}, μ are determined by least squares method.

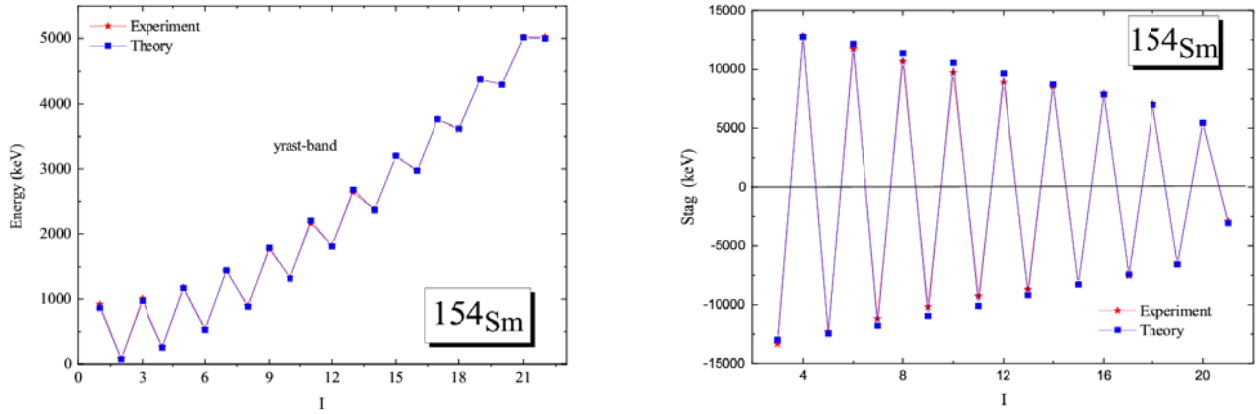


Figure 1. Theoretical and experimental energy levels of yrast-band with alternating parity (left) and "staggering" pattern (right) for ^{154}Gd with parameters: $\hbar\omega_0$=726.01 keV, μ=0.3666, ε_{eff}=0.00040, γ_{eff}=53.930, η_{eff}=85.520, RMS=72.73 keV.

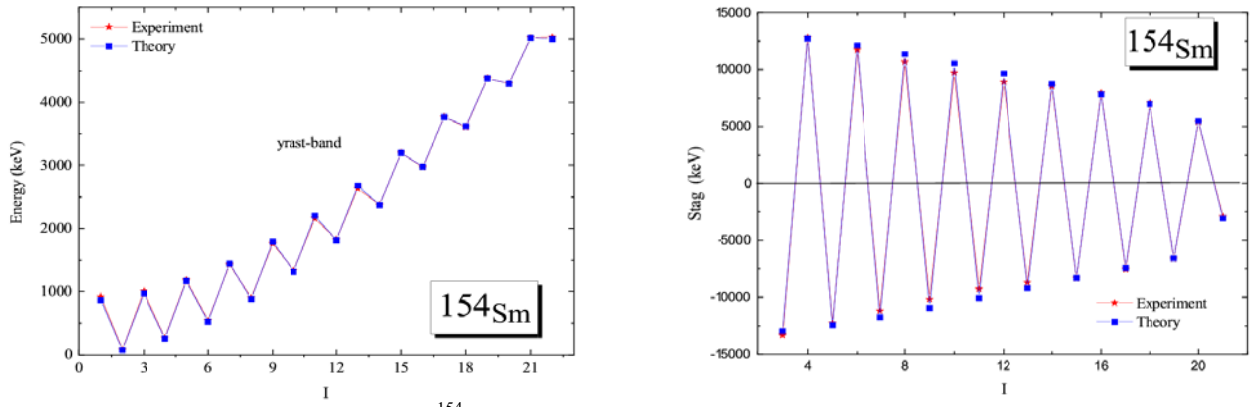


Figure 2. The same as in Fig. 1, but for ^{154}Sm with parameters: ω = 809.65 keV, μ = 0.306, ε_{eff} = 0.00240, γ_{eff} = 54.090, η_{eff} = 84.60, RMS = 22.73 keV.

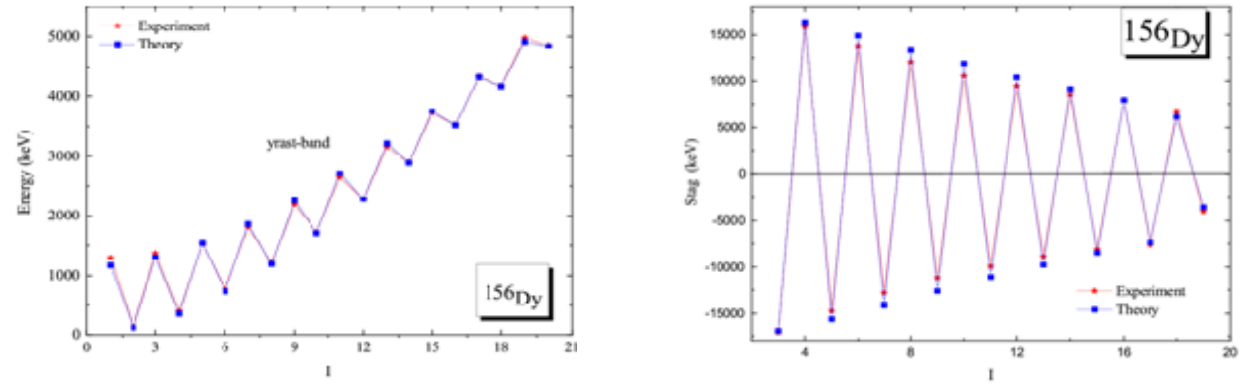


Figure 3. The same as in Fig. 1, but for ^{156}Dy with $\hbar\omega$=649.37 keV, μ=0.4165, ε_{eff}=0.0025°, γ_{eff}=54.09°, η_{eff}=39.96°, RMS=48.04 keV.

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

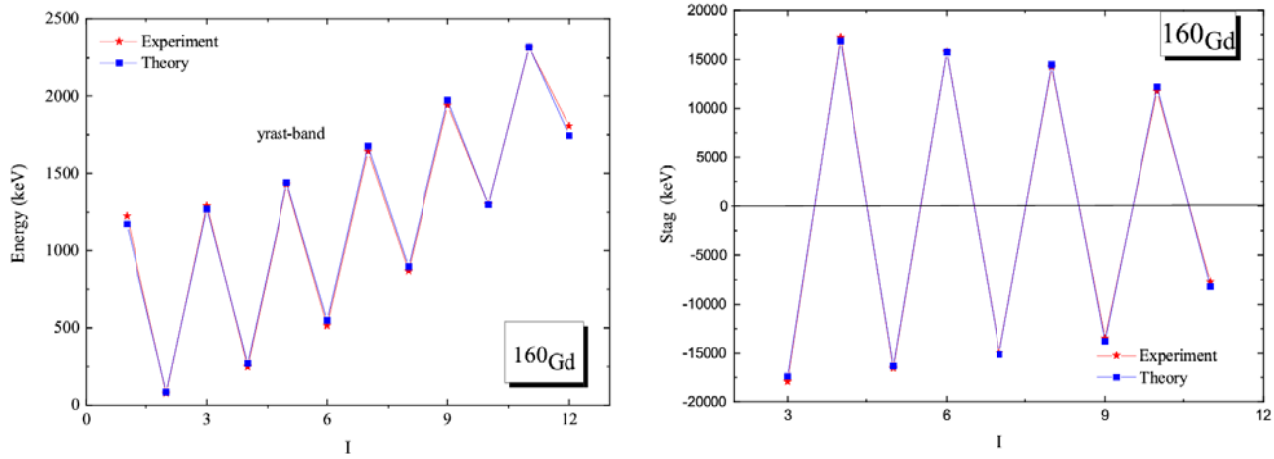


Figure 4. The same as in Fig. 1, but for ^{160}Gd with fitting parameters: $\hbar\omega_0$=531.14 keV, μ=0.3959, ε_{eff}=0.0039°, γ_{eff}=54.98°, η_{eff}=18.93°, RMS=31.81 keV.

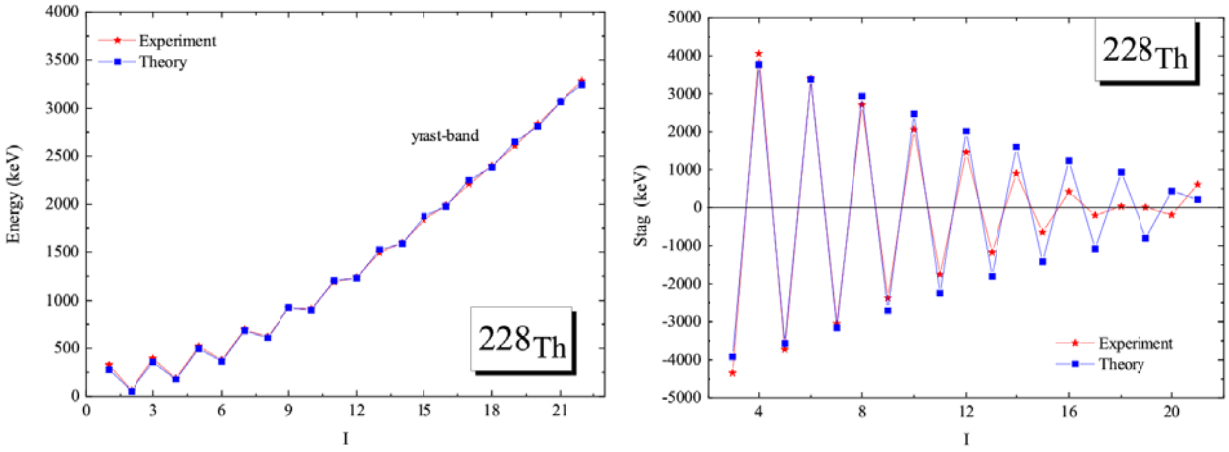


Figure 5. The same as in Fig. 1, but for ^{228}Th with fitting parameters: $\hbar\omega_0$=500.98 keV, μ=0.3217 ε_{eff}=0.0003^0, γ_{eff}=51.26^0, η_{eff}=61.81^0, RMS=24.93 keV.

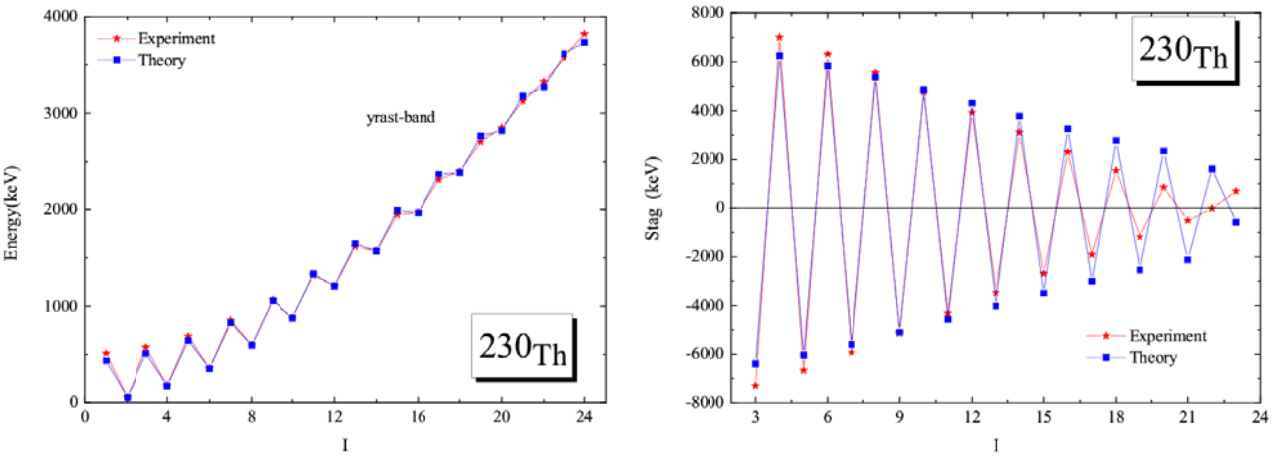


Figure 6. The same as in Fig. 1, but for ^{230}Th with fitting parameters: $\hbar\omega_0$=510.57 keV, μ=0.3155 ε_{eff}=0.0006^0, γ_{eff}=53.14^0, η_{eff}=84.98^0, RMS=40.02 keV.

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

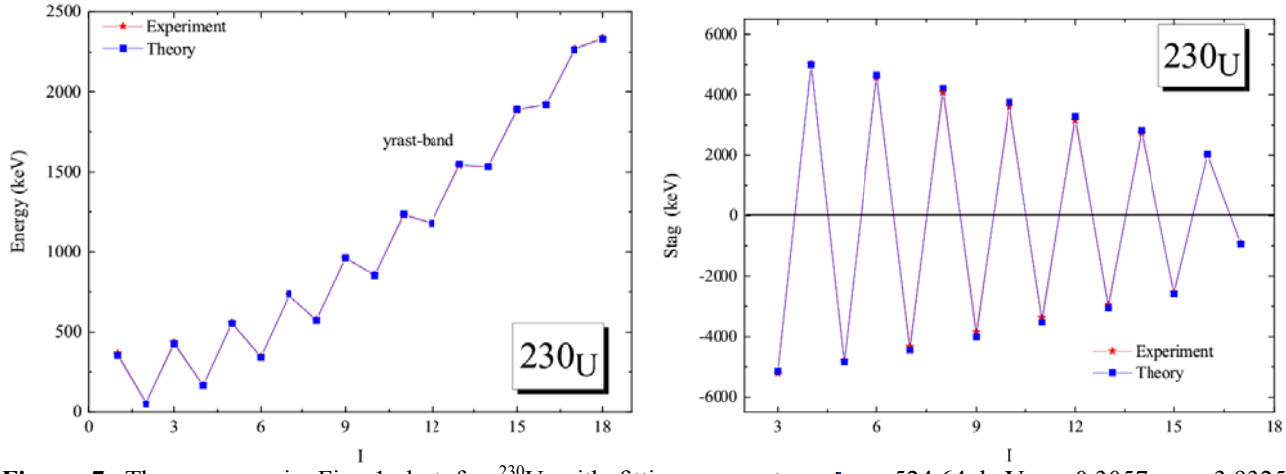


Figure 7. The same as in Fig. 1, but for ^{230}U with fitting parameters: $\hbar\omega_0$=524.64 keV, μ=0.3057, $\varepsilon_{eff}=3.9325^0$, $\gamma_{eff}=52.75^0$, $\eta_{eff}=45.69^0$, RMS=5.87 keV.

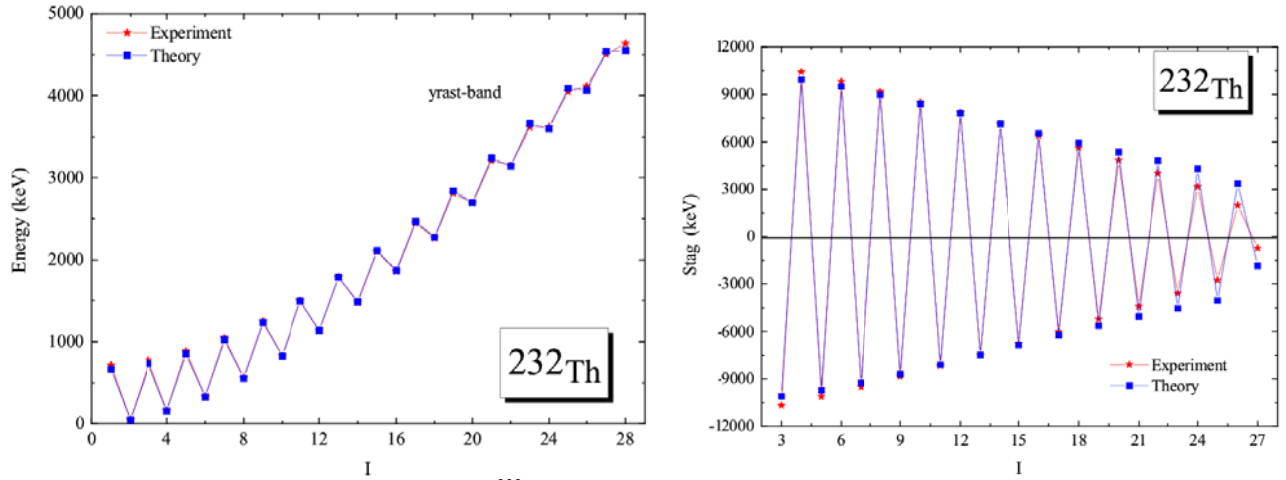


Figure 8. The same as in Fig. 1, but for ^{232}Th with fitting parameters: $\hbar\omega_0$=504.33 keV, μ=0.3078 $\varepsilon_{eff}=0.0001^0$, $\gamma_{eff}=54.7^0$, $\eta_{eff}=14.8^0$, RMS=28.7 keV.

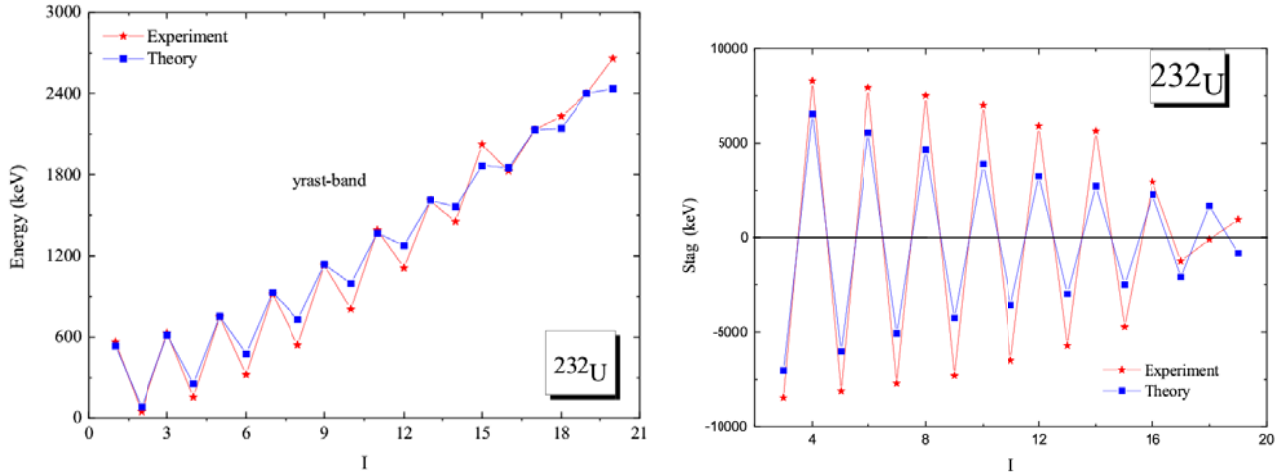


Figure 9. The same as in Fig. 1, but for ^{232}U with fitting parameters: $\hbar\omega_0$=268.23 keV, μ=0.5761, $\varepsilon_{eff}=9.9391^0$, $\gamma_{eff}=56.57^0$, $\eta_{eff}=35.38^0$, RMS=107.17 keV

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

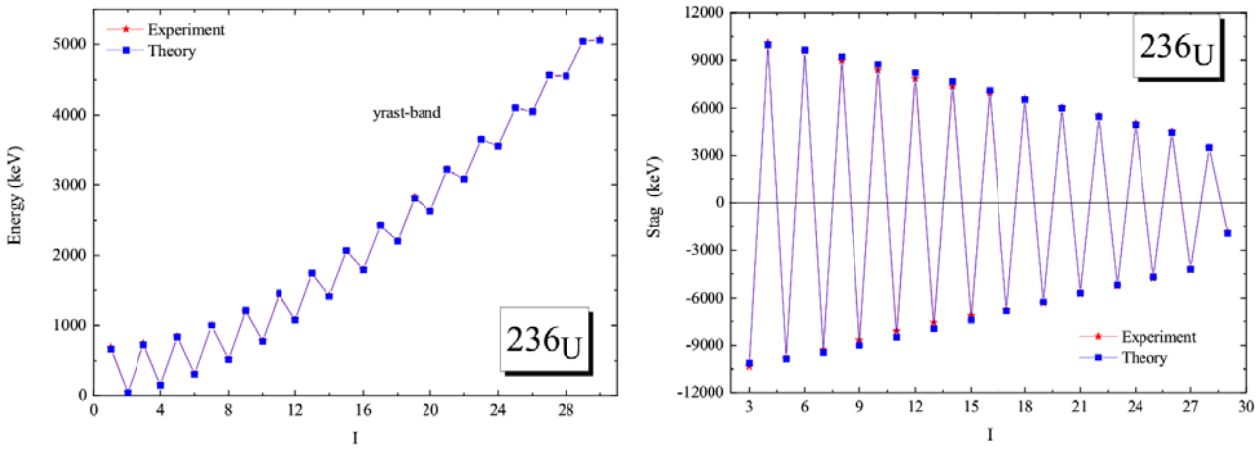


Figure 10. The same as in Fig. 1, but for ^{236}U with fitting parameters: $\hbar\omega_0$=566.06 keV, μ=0.2785, ε_{eff}=0.0062^0, γ_{eff}=54.86^0, η_{eff}=83.88^0, RMS=9.47 keV.

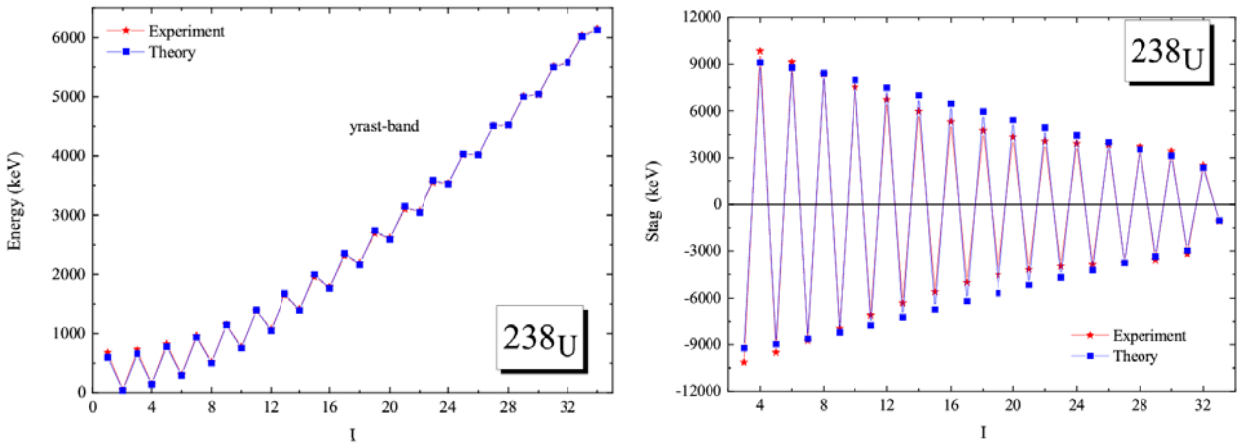


Figure 11. The same as in Fig. 1, but for ^{238}U with fitting parameters: $\hbar\omega_0$=589.89 keV, μ=0.2684, ε_{eff}=0.0003^0, γ_{eff}=54.68^0, η_{eff}=46.79^0, RMS=30.28 keV.

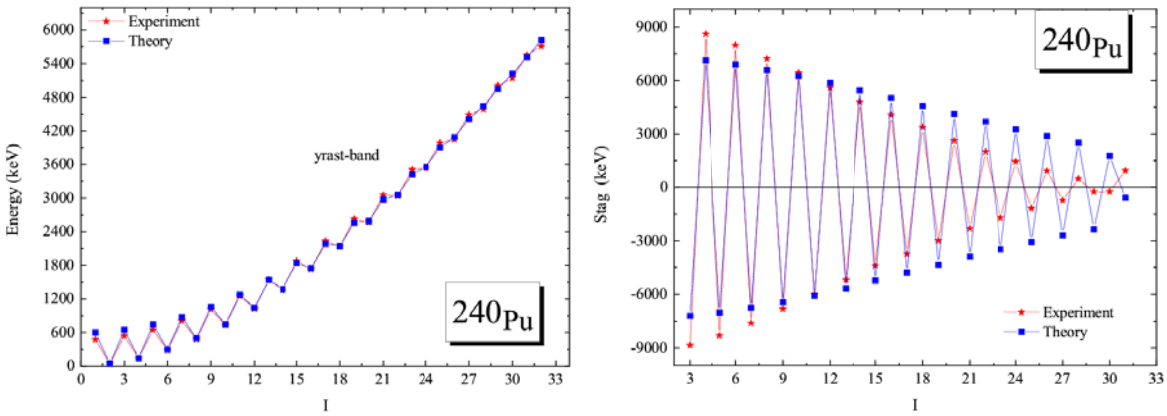


Figure 12. The same as in Fig. 1, but for ^{240}Pu with fitting parameters: $\hbar\omega_0$=698.37 keV, μ=0.24, ε_{eff}=0.0006^0, γ_{eff}=54.11^0, η_{eff}=39.55^0, RMS=59.16 keV

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

VI. Odd-even staggering structure

The detailed examination of the quadrupole-octupole collectivity in the considered nuclei on the basis of energy spectra as well as the assessment of model descriptions obtained through both potentials requires a more precise analysis of the APB (alternating parity band) structure [24]

$$\mathrm{Stag}(I) = 6\Delta E(I) - 4\Delta E(I-1) - 4\Delta E(I+1) + \Delta E(I+2) + \Delta E(I-2) \qquad (33)$$

with $\Delta E(I) = E(I+1) - E(I)$. The quantity (33) is very sensitive to the fine structure of the rotational spectra and is capable of revealing some rather impressive fluctuations $\Delta I=1$ (zigzag behavior of the discrete high-order energy derivative with respect to reference zero as a function of angular momentum) in various types of energy ranges of rotation and rotational oscillations. In Figs. (1)-(12) (right figs) presents the behavour $\Delta I=1$ staggering-effect.

In the present approach the staggering effect observed in the alternating-parity bands appears as the result of two model features:

i) association of the parity of the observed rotation states (the +/− phases in (21) and (20)) with the parity of the angular momentum values,

ii) mixing the different K-modes due to the assumed triaxial deformations.

We remark that in all considered alternating parity bands, the odd-even staggering does not vanish in the observed region of angular momenta. It is known that the vanishing staggering corresponds to a situation in which the odd and even angular momentum of level sequences (with negative and positive parities) appear ordered in a single nonperturbed collective ”octupole” band. The latter corresponds to the presence of stable quadrupole-octupole deformation. In the presently considered alternating parity bands, however, this does not happen and the observed band-structures are associated with the ”soft” vibrational-rotational quadrupole-octupole deformations.

VII. Conclusion

In this paper, we present a model description of the energy levels of the yrast-band with the alternating-parity spectra of heavy even-even nuclei in the framework of the non-adiabatic collective approach applied in the case of quadrupole-octupole deformations. The Schrödinger equation is solved for the Davidson potential. Analytical expressions for the energy spectrum and wave functions of the collective states of an even-even nucleus are obtained. The model description of the energy levels with alternating parity in the nuclei under consideration shows, on the whole, good agreement with the experimental data.

We note that the nuclei under consideration have a γ-band with large spin. In addition, the simultaneous description of energy levels of alternating and the identical parity, namely descriptions of yrast-, first non-yrast- and γ-bands, are the subject of future work.

References

[1] M. Girod, J.-P. Delaroche, A. G¨orgen, A. Obertelli. Phys. Lett. **676**, 39-66 (2009).

[2] P. Stransky, A. Frank, R. Bijker. J. Phys.: Conf. Ser. **322**, 56-84 (2011).

[3] D. Hirata, K. Sumiyoshi, I. Tanihata, Y. Sugahara, T. Tachibana, and H. Toki. Nucl. Phys. A **616**, 438 (1997) .RIKEN Preprint No. RIKEN-AF-NF-268.

[4] A. Bohr, and B.R. Mottelson. Nuclear Structure (W.A. Benjamin, New York, 1975.).

[5] Monica Karday, H.M. Mittal, and Rohit Mehra Pramana. J. Phys. **91**, 70 (2018).

[6] A.S. Davydov, G.F. Filippov. Nucl. Phys. **8**, 237 (1958).

[7] P.A. Butler and W. Nazarewicz. Nucl. Phys. A **533**, 249 (1991).

[8] N. Minkov, S. Drenska, M. Strecker, W. Scheid, and H. Lenske. Phys. Rev. C **85**, 034306 (2012).

[9] N. Minkov, P. Yotov, S. Drenska, W. Scheid, D. Bonatsos, D. Lenis, and D. Petrellis. Phys. Rev. C **73**, 044315 (2006).

[10] J.P. Davidson. Collective Models of the Nucleus (Academic Press Inc., New York, 1968).

[11] A.Ya. Dzuyblik and V.Yu. Denisov. Phys. At. Nucl. **56**, 303 (1993).

[12] V.Yu. Denisov, A.Ya. Dzyublik. Nucl. Phys. A **589**, 17 (1995).

[13] M.S. Nadirbekov, G.A. Yuldasheva, N. Minkov, and W. Scheid. IJMPE **21**, 1250044 (2012).

[14] http://www.nndc.bnl.gov/ensdf/

[15] A.S. Davydov. Excited States of Atomic Nuclei (Atomizdat, Moskva, 1967).

[16] A.S. Davydov and A.A. Chaban. Nucl. Phys. **20**, 499 (1960).

[17] M.S. Nadirbekov, N. Minkov, M. Strecker, and W. Scheid. Int. J. Mod. Phys. E **25**, 1650022 (2016).

[18] J.P. Davidson and M.G. Davidson. Phys. Rev. **138**, 316 (1965).

[19] S.A. Williams and J.P. Davidson. Can. J. Phys. **40**, 23 (1962).

[20] M.G. Davidson. Nucl. Phys. A **103**, 153 (1967).

[21] J.P. Davidson. Thechnical Report. The University of Kansas, Nuclear Physics Laboratory, Lawrence, Kansas. p.1-28 (1970).

[22] F. Iachello. Phys. Rev. Lett. **87**, 052502 (2001).

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

[23] N. Minkov, P. Yotov, S. Drenska, W. Scheid, D. Bonatsos, D. Lenis, and D. Petrellis. Phys. Rev. C **73**, 044315 (2006).

Квадруполь ва октуполь деформацияланган жуфт-жуфт ядроларнинг эффектив ноаксиаллиги

М.С. Надирбеков, О.А. Бозаров

ЎзР ФА ЯФИ Улуғбек шаҳарчаси, 100214, Тошкент, Ўзбекистон

Квадруполь ва октуполь деформацияланувчи оғир ноаксиал жуфт-жуфт ядроларнинг но-адиабатик коллектив модели ривожлантирилди. Ядро сиртининг квадруполь ва октуполь кўндаланг тебранишлари эффектив, бўйлама тебранишлари эса динамик равишда ҳисобга олинди. Таклиф этилган модель асосида оғир но-аксиал жуфт-жуфт ядроларнинг уйғонган ҳолатлари энергетик сатҳларининг аналатик кўринишдаги ифодаси олинди. Бу ифода назарий ҳисоблашларни экспериментал натижалар билан солиштириш орқали аниқланувчи бешта назарий параметрларга боғлиқ. Қутб координаталарининг бурчак қисми жуфт-жуфт ядронинг мувозанат вазиятини белгилайдиган параметр сифатида фойдаланилди. Ривожлантирилган модель асосида ^{150}Nd, ^{152,154}Sm, ^{172}Yb, ^{228,230,232}Th, ^{232,234,236,238}U ва ^{240}Pu оғир но-аксиал жуфт-жуфт ядроларнинг уйғонган ҳолатларининг yrast-полоса энергетик сатҳлари яхши тавсифланди.

Калит сўзлар: ноадиабатик коллектив модель, квадруполь ва октуполь деформациялар, yrast-полоса.

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

Одночастичная энтропия в двумерном электронном газе в узкозонных полупроводниках

G. Gulyamov[1], Б.Т. Абдулазизов[*,2], М.С. Тохиржонов[3], П.Ж. Байматов[3]

[1]Наманганский инженерно-строительный институт, ул. И. Каримова 12, 160103, Наманган, Узбекистан
[2]Физико-технический институт АН РУз, ул. Ч. Айтматова 2б, 100084,Ташкент, Узбекистан
[3]Наманганский государственный университет, ул. Уйчинская 316, 716019, Наманган, Узбекистан

Получена 24.12.2021

*Corresponding author: e-mail: bt_abdulazizov@mail.ru, Phone: +998 91 186 06 05, Fax: +998 71 235 42 91

Представляются численные и аналитические результаты изучения эффекта размерного квантования одночастичной энтропии в двумерном электронном газе в полупроводниковых материалах с непараболичной зоной проводимости. Анализируется зависимость одночастичной энтропии от химического потенциала газа в точках резонанса и вдали от них. Показано, что при низких температурах непараболичность зоны дает малую поправку к одночастичной энтропии. Как в точке резонанса, так и вдали от нее эта поправка пропорциональна произведению коэффициента непараболичности и температуры αT. Численным путем оценивается влияние уширения уровней пространственного квантования на одночастичную энтропию. Полученные результаты представлены для разных значений температуры, степени непараболичности зоны проводимости и величины уширения.

Ключевые слова: гетероструктуры, квантовая яма, пространственное квантование, двумерный электронный газ, вырожденный Ферми газ, химический потенциал, энергия Ферми, одночастичная энтропия, минизоны, узкозонные полупроводники, зоны непараболичности, фазовый переход.

Numerical and analytical results of studying the effect of size quantization of single-particle entropy in a two-dimensional electron gas in semiconductor materials with a nonparabolic conduction band are presented. The dependence of the one-particle entropy on the chemical potential of the gas at resonance point and far from it is analyzed. It is shown that at low temperatures the nonparabolicity of the band gives a small correction to the single-particle entropy. Both at the resonance point and far from it, this correction is proportional to the product of the nonparabolic coefficient and the temperature αT. The influence of the broadening of spatial quantization levels on the single-particle entropy is estimated numerically. The results obtained are presented for different temperatures, the degree of nonparabolicity of the conduction band, and the magnitude of the broadening.

Keywords: heterostructure, quantum well, size quantization, two-dimensional electron gas, degenerated Fermi gas, chemical potential, Fermi energy, single particle entropy, mini-bands, narrow band semiconductors, band nonparabolicity, phase transition.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.284

I. Введение

Экспериментальное и теоретическое изучение свойств газа носителей тока (электронов и дырок) в квантовых ямах полупроводниковых гетероструктур вызывают как фундаментальный, так и прикладной интерес. Пространственное квантование энергий носителей приводит к проявлению ряда интересных низкоразмерных эффектов [1-9].

Основной причиной проявления размерно-квантовых эффектов в газе является ступенчатое изменение плотности состояний в точках резонанса, где химический потенциал μ сравнивается с энергетическими уровнями E_n пространственного квантования. Изменение химического потенциала относительно энергетических уровней пространственного квантования можно наблюдать в зависимости от концентрации n_s или ширины квантовой ямы L. Ступенчатое изменение плотности состояний проявляется в наблюдаемых на опыте термодинамических и кинетических величинах.

Температурная зависимость химического потенциала $\mu(T)$ и/или его производная $\partial\mu/\partial T$ является одной из важных характеристик Ферми-газа. Из статистической физики известно, что почти все термодинамические и кинетические параметры газа непосредственно связаны с функцией $\mu(T)$. Определение производной $\partial\mu/\partial T$ также важно, например, для расчета теплоемкости как трехмерного [10], так и двумерного Ферми-газа [11].

С другой стороны, производная $\partial\mu/\partial T$ непосредственно связана с одночастичной энтропией газа, если учесть соотношение Максвелла [12, 13]

$$s=\left(\frac{\partial S}{\partial n_s}\right)_T=-\left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_{n_s}. \qquad (1)$$

Здесь S – энтропия и n_s – концентрация двумерного газа на единицу площади.

Согласно работе [12], одноэлектронную энтропию $\partial S/\partial n_s$ можно определить экспериментально. В теоретической работе [13] изучена энтропия, приходящаяся на один электрон (1) в зависимости от химического потенциала μ. Оказалось, что при низких температурах в точках резонанса $\mu = E_n$ (n=1,2,3…), имеет узкие пики, а высота и ширина этих пиков зависят от температуры и акта рассеяния (степени беспорядки).

В работе [14] изучена энтропия двумерного электронного газа S в зависимости от концентрации n_s. Показано, что если химический потенциал находится внутри какой-либо подзоны $E_n<\mu<E_{n+1}$, энтропия газа меняется с концентрацией двояким образом. В случае параболической зоны, S не меняется, а в случае непараболической зоны растет примерно линейно с концентрацией. Эти результаты показывают, что производная $\partial S/\partial n_s$ равна нулю для параболической зоны, и положительна для непараболической зоны. Величины скачков в точке резонанса больше для непараболической зоны.

Цель настоящей работы – расчет одночастичной энтропии (1) для случая электронов квазидвумерного газа с непараболической дисперсией. При низких температурах получены аналитические формулы для $s(T)$ в точках резонанса и вдали от них. Показано, что при низких температурах непараболичность зоны дает малую поправку к одночастичной энтропии, имеет порядок $\sim\alpha T$. Влияние уширения уровней пространственного квантования Г на одночастичную энтропию изучено численно. Результаты представлены для разных значений температуры, степени непараболичности зоны проводимости и величины уширения.

II. Основные соотношения

Уровни размерного квантования для конкретной квантовой ямы гетероструктур определяются квантовомеханическими расчетами [3]. Для наших целей достаточно применять простую модель квантовой ямы с бесконечно высокими стенками. Если предполагать, что квантовая яма выращена по оси Z, то на основе двухзонной модели Кейна дисперсию электрона можно представить в виде [15]

$$E(1+\alpha E)=\frac{\hbar^2k^2}{2m_n}+E_1i^2, \quad E_1=\frac{\hbar^2\pi^2}{2m_nL^2}. \qquad (2)$$

Здесь $k(k_x, k_y)$ – волновой вектор электрона в плоскости квантовой ямы, m_n – эффективная масса электрона на дне зоны проводимости, L – ширина ямы. Значения параметра непараболичности зоны α можно оценить по формуле [16]

$$\alpha=\frac{1}{\varepsilon_g}\left(1-\frac{m_n}{m_0}\right)^2. \qquad (3)$$

Зонные параметры полупроводниковых материалов из группы A_3B_5, которые используются в численных расчетах, приведены ниже.

Соединение	InSb	InAs	GaSb	InP	GaAs
ε_g, eV	0.237	0.42	0.813	1.423	1.519
m_n/m_0	0.014	0.023	0.041	0.08	0.067
α, eV^{-1}	4.1	2.27	1.13	0.6	0.57

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

При $k = 0$ из (2) следует: $E_i(1+\alpha E_i) = E_1 i^2$. Тогда его можно представить в виде

$$E_1(1+\alpha E) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n} + E_i(1+\alpha E_i),$$
$$E_i = \frac{\sqrt{4\alpha E_1 i^2 + 1} - 1}{2\alpha}. \quad (4)$$

Используя спектр (4), можно найти уравнение для полной двумерной концентрации электронного газа

$$n_s = \int_0^\infty dE g(E) f(E),$$
$$g(E) = g_0(1+2\alpha E)\sum_{i=1}\theta(E-E_i). \quad (5)$$

Здесь $\theta(x)$ – функция Хэвисайда, $g_0 = m_n/\pi\hbar^2$ и $f(E)$ – функция распределения Ферми-Дирака

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-\mu}{T}\right)+1},$$

где через T, [eV] обозначена величина $k_B T$ (k_B – постоянная Больцмана). В уравнении (5) слагаемые под знаком суммы должны быть положительными. Отрицательные слагаемые исключаются функцией $\theta(x)$.

Для расчета одночастичной энтропии, согласно формуле (1), необходимо найти производную $\partial\mu/\partial T$ из условий постоянства числа частиц [10]. Из (5) можно найти, что

$$s = 2\frac{(1+2\alpha\mu)J_1 + 4\alpha T J_2}{(1+2\alpha\mu)J_0 + 4\alpha T J_1}, \quad (6)$$

где

$$J_0 = \sum_{i=1}^{M}\int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty}\frac{dx}{\cosh^2 x}, \quad J_1 = \sum_{i=1}^{M}\int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty}\frac{xdx}{\cosh^2 x},$$
$$J_2 = \sum_{i=1}^{M}\int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty}\frac{x^2 dx}{\cosh^2 x}. \quad (7)$$

Здесь $x = (E-\mu)/2T$.

III. Анализ при низких температурах

Сначала рассмотрим низкотемпературную асимптотику (ур-ние 6) в точке резонанса, где химический потенциал газа равен энергии некоторого N-го уровня пространственного квантования. Эти условия можно написать в виде $T \ll E_{n+1} - E_n$, $\mu = E_N$, $N < M$, где M – максимальное число уровней в квантовой яме. Первое условие означает, что тепловая энергия электрона вблизи энергии Ферми значительно меньше межуровневых расстояний (энергий).

Выделяя N-й член, перепишем

$$J_0 = \sum_{i=1}^{M}\int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty}\frac{dx}{\cosh^2 x} = \sum_{i=1}^{N-1}\int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty}\frac{dx}{\cosh^2 x} + \int_{\frac{E_N-\mu}{2T}}^{\infty}\frac{dx}{\cosh^2 x} + \sum_{i=N+1}^{M}\int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty}\frac{dx}{\cosh^2 x}.$$

Поскольку в резонансной точке $\mu = E_N$ и $\mu > E_{N-1}, E_{N-2}, \ldots E_1$, то, согласно условию $T \ll E_{n+1} - E_n$, нижний предел первого интеграла полагаем равным $-\infty$. Аналогично, при условии $T \ll E_{n+1} - E_n$, нижний предел третьего интеграла стремится к ∞, поскольку $\mu < E_{N+1}, E_{N+2}, \ldots E_M$. Тогда третьим слагаемым можно пренебречь, оно экспоненциально мало. Таким образом, в низкотемпературном пределе J_0 имеет вид

$$J_0 = \sum_{i=1}^{N-1}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\cosh^2 x} + \int_0^\infty\frac{dx}{\cosh^2 x} + 0 = (N-1)\int_{-\infty}^{\infty}\frac{dx}{\cosh^2 x} + \int_0^\infty\frac{dx}{\cosh^2 x} = 2(N-1)+1 = 2N-1$$

Аналогично, можно упростить J_1 и J_2. Они сводятся к виду $J_1 = \ln 2$, $J_2 = \pi^2(N-1/2)/6$. Подставляя найденные выражения в формулу (6), приходим к результату

$$s_N = \frac{(1+2\alpha E_N)\ln 2 + 2\alpha\pi^2 T(N-1/2)/3}{(1+2\alpha E_N)(N-1/2) + 2\alpha T\ln 2}. \quad (8)$$

Здесь учтено, что $\mu = E_N$. Поскольку $E_N = (\sqrt{4\alpha E_1 N^2 + 1} - 1)/2\alpha$, в пределе $T \to 0$ из формулы (8) следует

$$s_N = \frac{\ln 2}{N-1/2} + \frac{2\alpha T(\pi^2/3 - (\ln 2/(N-1/2))^2)}{\sqrt{4\alpha E_1 N^2 + 1}}. \quad (9)$$

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Эта формула предсказывает влияние степени непараболичности зоны на одночастичную энтропию в двумерном электронном газе в точке резонанса. При получении формулы (8) мы пренебрегали экспоненциальными малыми членами в исходной формуле (6). Оказалось, что из-за непараболичности зоны линейные по T члены не исчезали. При T=0 или α=0 из формулы (9) следует формула для параболической зоны [13]

$$s_N(0) = -\frac{\partial \mu}{\partial T} = \frac{\ln 2}{N - 1/2}. \qquad (10)$$

Для представления ниже приведены оценки нескольких значений (9) при N=2,3,4,5,6 и при E=10 meV, α=4 eV^{-1}, T=3 meV (35 K). Видно, что как $s_N(0)$, так и поправки от непараболичности зоны Δs_N (где Δs_N – последний член в формуле(9)) уменьшаются с ростом номера энергетического уровня N

N	$s_N(0)=\ln 2/(N-1/2)$	Δs_N	s_N
2	0.462	0.058	0.520
3	0.277	0.049	0.327
4	0.198	0.041	0.240
5	0.154	0.035	0.190
6	0.126	0.030	0.156

Однако, относительные доли поправок от непараболичности зоны растут с ростом N. Так например, для N=2 она составляет 11% от s_N, для N=6 составляет 20% от s_N.

Теперь рассмотрим низкотемпературные асимптотики (6) в точке, где химический потенциал находится примерно в середине между двумя энергетическими уровнями пространственного квантования. Эти условия можно написать в виде $T \ll E_{n+1}-E_n$, $E_{N-1}<\mu<E_N$, $N<M$.

В данном случае в суммах (7) можно пренебречь вкладами слагаемых с $\mu<E_N, E_{N+1}, \ldots E_M$. Здесь, кроме условия $T \ll E_{n+1}-E_n$, подразумевается также $T \ll \mu - E_{N-1}$ и $T \ll E_N - \mu$. Тогда имеем

$$J_0 = \sum_{i=1}^{M} \int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty} \frac{dx}{\cosh^2 x} = \sum_{i=1}^{N-1} \int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty} \frac{dx}{\cosh^2 x} + 0 = (N-1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{\cosh^2 x} = 2(N-1),$$

$$J_1 = \sum_{i=1}^{M} \int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty} \frac{x dx}{\cosh^2 x} = \sum_{i=1}^{N-1} \int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty} \frac{x dx}{\cosh^2 x} + 0 = (N-1) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x dx}{\cosh^2 x} = 0,$$

$$J_2 = \sum_{i=1}^{M} \int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty} \frac{x^2 dx}{\cosh^2 x} = \sum_{i=1}^{N-1} \int_{\frac{E_i-\mu}{2T}}^{\infty} \frac{x^2 dx}{\cosh^2 x} + 0 = (N-1)\frac{\pi^2}{6}.$$

Подставляя найденные выражения в формулу (6) приходим к результату

$$s_N = \frac{2\alpha T \pi^2}{3(1+2\alpha\mu)}. \qquad (11)$$

Здесь можно полагать $\mu=(E_{N-1}+E_N)/2$. Отсюда видно, что s_N уменьшается с ростом номера энергетического уровня N. Таким образом, в случае непараболической зоны одночастичная энтропия s_N (или темп изменения химического потенциала с температурой $\partial\mu/\partial T$) всегда больше, чем в случае параболической зоны. Это связано с зависимостью плотности состояний (5) от энергии.

IV. Численные результаты и обсуждение

Интегралы в выражениях (7) можно вычислять численно. Их можно выразить также полулогарифмическими функциями [17]. Анализ этих функций при низких температурах опять приводит к результатам (8-11). Согласно формуле (2), энергия E_1 определяется значением эффективной массы на дне зоны проводимости m_n и ширины квантовой ямы L.

Согласно формуле (4), энергетические уровни электрона в квантовой яме определяются значением энергии первого уровня E_1 и параметра непараболичности зоны α. Ниже в численных расчетах параметра E_1 полагается заданным E_1=0.01 eV. Тогда, например, первые четыре уровня энергии при α=0, $E_i = Ei^2$ равны E_i=0.01, 0.04, 0.09, 0.016 eV, а при α=4.1 eV^{-1}, $E_i = (\sqrt{4\alpha E_1 i^2 + 1} - 1)/2\alpha$, E_i=0.0096, 0.035, 0.07, 0.11 eV.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Результаты численного моделирования ур. (1) для разных значений α и T показаны на рис. 1. При низких температурах одночастичная энтропия проявляется в виде узких пиков в резонансных точках (рис. 1a). Известно, что с ростом степени непараболичности зоны эффективная масса электрона растет, а квантованные уровни энергии уменьшаются [3, 4, 14-16]. Это приводит к тому (см. рис. 1a), что серии пиков с большим номером N сильно разделены – расположены далеко друг от друга. Высоты пиков, относящихся к одному значению N, почти равны. Иначе говоря, при низких температурах непараболичность зоны не изменяет высоты пиков, что согласуется с (10).

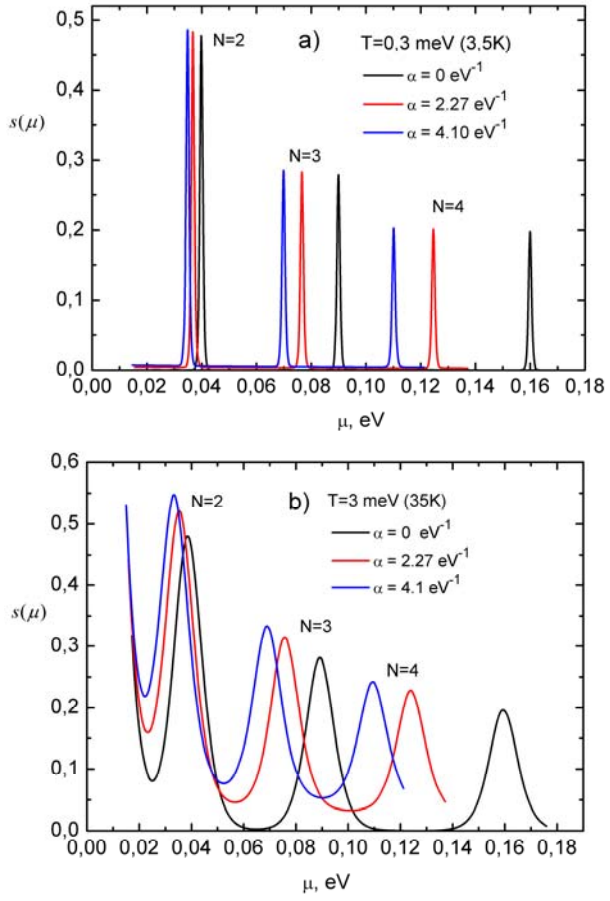


Рисунок 1. Зависимости одночастичной энтропии двумерного электронного газа от химического потенциала при различных значениях степени непараболичности.

С ростом температуры (рис. 1b) график смещается вверх, причем, чем больше коэффициент α, тем больше смещения. Этот результат согласуется с предсказанием по формулам (9) и (11).

Надо отметить, что во всех представленных графиках резонансная точка $\mu = E_1$, где химический потенциал газа равен первому квантовому уровню электрона, не показана. Для того, чтобы при низких температурах химический потенциал находился вблизи первого уровня, концентрация газа должна быть достаточно малой. При малых концентрациях взаимодействие между электронами может играть существенную роль. Это обстоятельство требует учесть в теории важные эффекты, как-то: вигнеровская кристаллизация газа, перенормировка спектра электрона и.т.д. Такие вопросы обсуждены, н-р, в [12, 13].

На рис. 2 показаны зависимости $s(\mu)$ при трех температурах как параболической (рис. 2a) так и непараболической (рис. 2b) зоны. Их сравнение показывает, что в обоих случаях высокие температуры размывают пики. Однако в случае непараболической зоны размытие пиков происходит быстрее. Это связано с уменьшением значений как отдельных энергетических уровней, так и расстояния между ними.

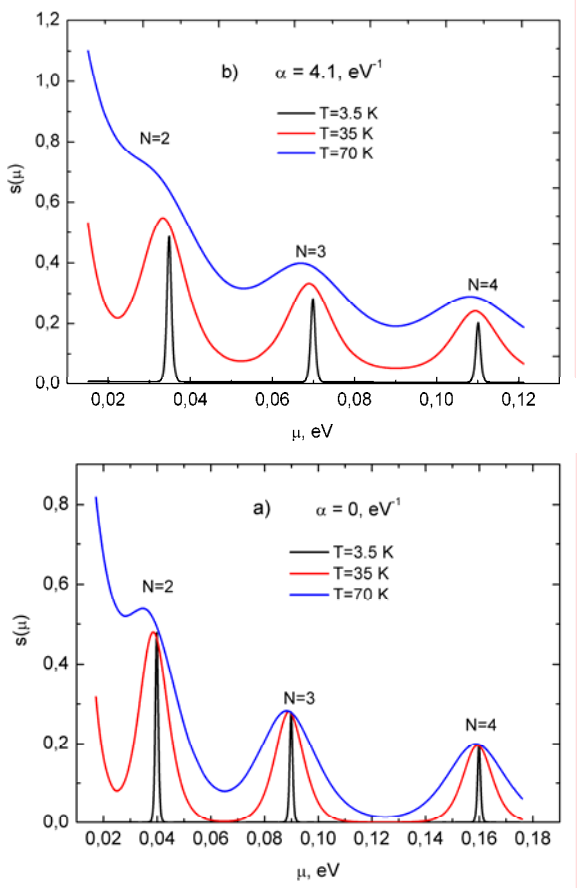


Рисунок 2. Зависимости одночастичной энтропии двумерного электронного газа от химического потенциала при различных значениях температуры.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

На рис. 3 представлена зависимость одночастичной энтропии от химического потенциала газа при следующих параметрах α = 4.1 eV^{-1}, N = 2,3,4. Для проверки аналитических результатов на этом же рисунке приведены горизонтальные линии соответствующих значений $s(\mu)$ в резонансных точках по формулам (9) и (11). Надо отметить, что аналитические формулы справедливы только для низких температур. Сравнения проведены для температуры T = 9.3 К. При этом условие $T \ll E_{n+1} - E_n$ хорошо выполняется.

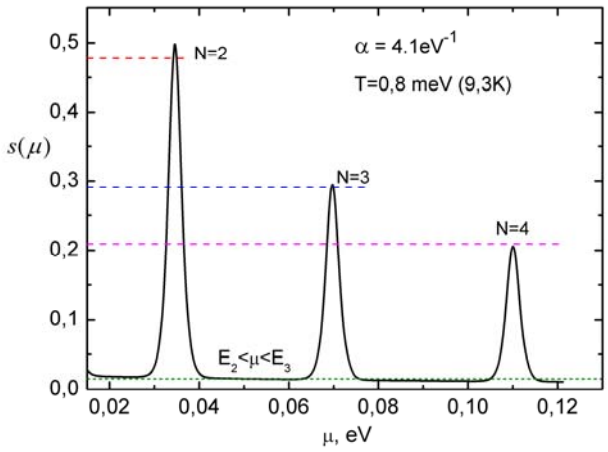


Рисунок 3. Сравнение аналитических формул (9) и (11) с численным результатом.

Как видно из рис. 3, высота пика с N=2, полученным численным путем, больше, нежели дает аналитическая формула (горизонтальная линия). Эта разница может быть связана с асимметрией плотности состояний относительно химического потенциала [13]. Для больших значений N=3,4,… эта разность постепенно уменьшается.

Самая нижняя горизонтальная линия соответствует аналитической формуле (11), где значение химического потенциала полагалось равным $\mu = (E_2+E_3)/2$. Из сравнений ясно, что при низких температурах аналитические формулы (9) и (11) дают верные результаты.

Из формулы (5) для плотности состояний видно, что проявления квантоворазмерных эффектов в двумерном газе непосредственно связаны с дискретным изменением функции Хэвисайда $\theta(E-E_i)$ по энергии E. В простой модели идеального Ферми-газа время жизни электрона τ предполагается бесконечным. В реальных ситуациях, из-за процесса рассеяния, время жизни τ станет конечным $\tau \sim \hbar/\Gamma$, что соответствует конечной ширине квантованных уровней Г. Но, оставаясь в модели идеального Ферми-газа, его можно учитывать феноменологически, заменив функции Хэвисайда $\theta(E-E_i)$ его представлением (например, [3, 4, 13]).

$$\theta(E-E_i) \to \theta_\Gamma(E-E_i) = \frac{1}{\pi}\left[\frac{\pi}{2} + \arctan\left(\frac{E-E_i}{\Gamma}\right)\right].$$

Для нахождения выражения для одночастичной энтропии (или $\partial\mu/\partial T$) снова воспользуемся условием постоянства числа частиц (5). Однако конкретные результаты получены численным путем.

На рис. 4 представлены зависимости одночастичной энтропии от химического потенциала газа при следующих параметрах T = 35 К, α = 4.1 eV^{-1}, N = 2,3,4 и Г = 0, 0.6, 1.5 meV. Как видно из рис. 4, с ростом параметра уширения максимумы одночастичной энтропии понижаются, а минимумы поднимаются. Иначе говоря, амплитуды пиков подавляются.

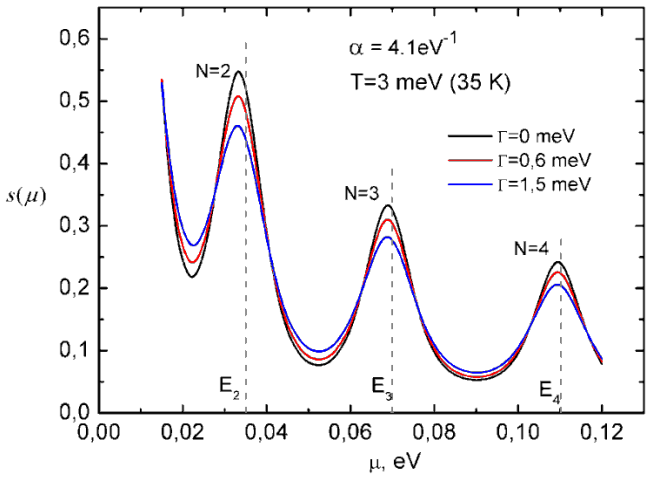


Рисунок 4. Зависимости одночастичной энтропии двумерного электронного газа от химического потенциала с учетом уширения уровней

V. Заключение

Численные и аналитические результаты данной работы показывают, что непараболичность зоны проводимости заметно влияет на одночастичную энтропию s двумерного электронного газа.

Согласно аналитическим формулам (9) и (11), эта величина пропорциональна произведению коэффициента непараболичности и температуры αT.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Поэтому при достаточно низких температурах непараболичность мало изменяет высоты пиков, однако расположение пиков смещается влево по сравнению с параболическим приближением (рис. 1a). Это смещение обусловлено известным эффектом, ростом эффективной массы электрона. С повышением температуры поправки от непараболичности зоны более заметны, как показывает рис. 1b. Линия зависимости s(μ) смещена вверх, что отчетливо наблюдается во втором пике N=2.

Расчеты, представленные на рис. 4, показывают, что уширение квантовых уровней, обусловленное процессами рассеяния подавляет эффективную высоту пиков.

Благодарности. Работа выполнена по гранту ФЗ-20200929243 «Влияние горячих электронов и фононов в сильном электромагнитном поле на характеристики полупроводниковых солнечных фотоэлектрических элементов и наноструктур».

Single-particle entropy in two-dimensional electron gas in a narrow-band semiconductors

G. Gulyamov[1], B.T. Abdulazizov[2], M.S. Tokhirjonov[3], P.J. Baymatov[3]

[1]Namangan Engineering Construction Institute, И. Каримов str.12, 160103 Namangan, Uzbekistan
[2]Physical-Technical Institute, Uzbekistan Academy of Sciences, Chingiz Aytmatov str. 2B, 100084 Tashkent, Uzbekistan
[3]Namangan State University, Uychi str. 316, 716019 Namangan, Uzbekistan

Numerical and analytical results of studying the effect of size quantization of single-particle entropy in a two-dimensional electron gas in semiconductor materials with a nonparabolic conduction band are presented. The dependence of the one-particle entropy on the chemical potential of the gas at resonance points and far from it is analyzed. It is shown that at low temperatures the nonparabolicity of the band gives a small correction to the single-particle entropy. In both of the resonance point and far from it, this correction is proportional to the product of the nonparabolic coefficient and the temperature αT. The influence of the broadening of spatial quantization levels on the single-particle entropy is estimated numerically. The results obtained are presented for different temperatures, the degree of nonparabolicity of the conduction band, and the magnitude of the broadening.

Keywords: heterostructure, quantum well, size quantization, two-dimensional electron gas, degenerated Fermi-gas, chemical potential, Fermi energy, single particle entropy, minibands, narrow-band semiconductors, band nonparabolicity, phase transition

Литература (References)

[1] T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern. Electronic properties of two-dimensional systems, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
[2] L.L. Chang. Electron properties of semiconductor heterostructures in magnetic field. In: Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures. Edited by L.L. Chang and K. Ploog (Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1985).
[3] G. Bastard. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les Editions de Physique (New York, Halsted Press, 1988).
[4] G. Bastard, J.A. Brunt, R. Ferreira. Electronic Ssates in semiconductor heterostructures. Solid State Physics **44**, 229-415 (1991).
[5] C.W.J. Beenaker, H. von Houten. Quantum transport in semiconductor nanostructures. Solid State Phys. **44** (1991).
[6] S. Datta. Electronic transport in mesoscopic systems (Cambridge, Univ. Press, 1995).
[7] Y. Imry. Introduction to mesoscopic physics (Oxford, Univ. Press, 1997).
[8] A.Ya. Shik, L.G. Bakueva, S.F. Musikhin, S.A. Rykov. Fizika nizkorazmthnykh system Ed. A.Ya. Shik (Sankt-Peterburg, Nauka, 2001).
[9] E. Gornik, R. Lassnig, G. Strasser, H. L. Stormer, A.C. Gossard, W. Wiegmann. Specific heat of two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs multilayers. Physical Review Letters **54**, No.16, 1820-1823 (1985).
[10] A.A. Abrikosov. Fundamentals of the Theory of Metals (Elsevier, Amsterdam, 1989).
[11] P.J. Baymatov, A.G. Gulyamov, and B.T. Abdulazizov. On the heat capacity of a quasi-two-dimensional electron gas. Advances in Condensed Matter Physics (Hindawi Publishing Corporation) **2019**, Article ID 8317278, 6 pages, https://doi.org/10.1155/2019/8317278.
[12] A.Yu. Kuntsevich, I.V. Tupikov, V.M. Pudalov, Y.S. Burmistrov. Strongly correlated two-dimensional plasma explored from entropy measurements. Nat. Commun. **6**, 7298 (2015).
[13] A.A. Varlamov, A.V. Kavokin, and Y.M. Galperin. Quantization of entropy in a quasi-two-dimensional electron gas. Phys. Rev. B **93**, 155404 (2016). doi: 10.1103/ PhysRev B.93.155404
[14] P.J. Baymatov, B.T.Abdulazizov. On the thermodynamics of a two-dimensional electron gas with non-parabolic dispersion. World Journal of Condensed Matter Physics **6**, 294-299 (2016).
[15] B.M. Askerov. Electron transport phenomena in semiconductors. (World Scientific, Singapore, 1994).
[16] B.K. Ridley. Quantum processes in semiconductors (Clarendon Press, Oxford, 1982).
[17] Polylogarithms and associated functions, by Leonard Lewin, (North-Holland, Amsterdam, 1981).

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Тор зонали яримўтказгичлардаги икки ўлчамли электрон газда битта заррага тўғри келувчи энтропия

Г. Гулямов[1], Б.Т. Абдулазизов[2], М.С. Тохиржонов[3], П.Ж. Байматов[2]

[1]Наманган муҳандислик-қурилиш институти, И. Каримов кўчаси, 12 уй, 160103, Наманган, Ўзбекистан
[2]ЎзР ФА Физика-техника институти, Ч. Айтматов кўчаси 2б, 100084, Тошкент, Ўзбекистон
[3]Наманган давлат университети, Уйчи кўча 316, 716019, Наманган, Ўзбекистон

Ўтказувчанлик зонаси нопараболик бўлган яримўтказгич материаллардаги икки ўлчамли электрон газида битта электронга тўғри келувчи энтропияни ўлчамли квантланиш эффектлари тадқиқотининг сонли ва аналитик тахлил натижалари келтирилган. Бир электронга тўғри келувчи энтропияни химиявий потенциалга боғланиши резонанс нуқталарда ва улардан узоқда тахлил қилинган. Натижалардан кўринишича, паст температураларда зона нопараболиклиги туфайли пайдо бўлган тузатма кичик бўлиб, у резонанс нуқталарда ва ундан узоқда хам зонани нопараболик коэффициент ва температура кўпайтмаси αT га пропорционал экан. Ўлчамли квантланиш энергияси кенглигини битта электрон энтропиясига таъсири сонли усуллар ёрдамида баҳоланган. Олинган натижалар температуранинг турлича қийматларида ўтказувчанлик зонаси нопараболиклиги даражаси ва квант сатҳлар кенглиги келтирилган.

Калит сўзлар: гетеротузилмалар, квант ўра, ўлчамли квантланиш, икки ўлчамли электрон гази, айниган Ферми-газ, химиявий потенциал, Ферми энергияси, битта зарра энтропияси, минизоналар, тор зонали яримўтказгичлар, нопараболик зона, фазавий ўтиш.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

К теории трех и четырех фотонного линейно-циркулярного дихроизма в *p*-GaAs

Р.Я. Расулов[*,1], В.Р. Расулов[1], И. Эшболтаев[2], М.Х. Кучкаров[2]

[1] Ферганский государственный университет, ул. Мураббийлар 19, 150100, Фергана, Узбекистан
[2] Кокандский государственный педагогический институт, ул. Турон 19, 150700, Коканд, Узбекистан

Получена 03.12.2020.

* Corresponding author: e-mail r_rasulov51@mail.ru, Phone: +998 97 595 62 77.

Рассчитаны матричные элементы трех и четырехфотонных оптических переходов между подзонами валентной зоны полупроводника кубической симметрии. При этом учтен вклад одновременного трехфотонного взаимодействия в суммарный матричный элемент трех и четырехфотонных оптических переходов, и показано, что этот вклад зависит как от знака, так и численного значения параметра перед кубическим по волновому вектору дырок слагаемым в эффективном гамильтониане.

Ключевые слова: трех и четырех фотонные оптические переходы, начальное, виртуальное и конечное состояния, полный матричный элемент, эффективный гамильтониан, линейно-циркулярный дихроизм, закон сохранения энергии в трех фотонных оптических переходах.

Matrix elements of three- and four-photon optical transitions occurring between the subbands of the valence band of semiconductor of cubic symmetry are calculated. In this case, the contribution of the simultaneous three-photon interaction to the total matrix element of three- and four-photon optical transitions is taken into account, and it is shown that this contribution depends on both the sign and the numerical value of the parameter of the term cubic in the hole wave vector in the effective hamiltonian.

Keywords: .three- and four-photon optical transitions, initial, virtual and final states, total matrix element, effective Hamiltonian, linear-circular dichroism, law of conservation of energy in three-photon optical transitions.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.285

I. Введение

При поглощении линейно и циркулярно поляризованного света разрешены многоквантовые оптические переходы через виртуальные электронные состояния, находящиеся как в валентной и в зоне проводимости, так и в далеко расположенных зонах [1-11]. По закону сохранения углового момента носителей тока физическая природа оптических переходов зависит от степени поляризации света. В частности, при N фотонном поглощении циркулярно поляризованного света фотовозбужденные носители будут иметь отличные от нуля угловые моменты, так что следующие фотоны будут взаимодействовать с оптически ориентированными носителями тока. По правилу отбора рассматриваемого оптического перехода для проекции моментов носителей тока относительно волнового вектора фотона вероятности двух- и трехфотонных оптических переходов будут зависеть как от частоты, так и от степени поляризации света [7-11]. Последнее приводит к выявлению линейно-циркулярного дихроизма поглощения света. Это верно тогда, когда не учтена зависимость поглощения поляризованного излучения от анизотропия полупроводникового кристалла.

Заметим, что при исследовании некоторых оптических параметров полупроводника, например, при расчетах одно- и многофотонного коэффициента поглощения поляризованного излучения или поляризационно-зависимого фототока (см., н-р, [7-10]), требуется произвести расчеты матричных элементов рассматриваемых оптических переходов. Поэтому далее будем анализировать матричные элементы оптических переходов для конкретных случаев.

II. Трехфотонный линейно-циркулярный дихроизм

Проанализируем трехфотонные оптические переходы между подзонами тяжелых и легких дырок валентной зоны полупроводника. Матричные элементы всех типов трехфотонных оптических переходов выражаются как:

$$M^{(3)}_{m\vec{k},m'\vec{k}} = M^{(3)}_{m,m'} = \sum_{m''',m''=\pm1/2,\pm3/2}\left(\frac{M^{(1)}_{m,m'''}M^{(1)}_{m''',m''}M^{(1)}_{m'',m'}}{\left(E_{m'''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - \hbar\omega\right)\left(E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - \hbar\omega\right)} + \right.$$
$$\left. + \frac{M^{(1)}_{m,m''}M^{(2)}_{m'',m'}}{\left(E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - 2\hbar\omega\right)} + \frac{M^{(2)}_{m,m''}M^{(1)}_{m'',m'}}{\left(E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - \hbar\omega\right)} + \left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^3 \left[H^{(3)}_{\Gamma_6}(\vec{e}')\right]_{m,m'}, \right. \quad (1)$$

Здесь первое слагаемое описывается диаграммой , второе – диаграммой , третье – диаграммой , четвертое – диаграммой ,

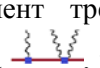
$$\tilde{M}^{(3)}_{m'',m'} = \left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^3 \left[H^{(3)}_{\Gamma_6}(\vec{e}')\right]_{m,m'},$$

$H^{(N)}_{\Gamma_6}(\vec{e}') = H^{(N)}_{\Gamma_6}\left(\vec{k}\to\vec{e}'\right)$, $H^{(N)}_{\Gamma_6}\left(\vec{k}\right)$ – эффективный гамильтониан дырок в представлении Латтинжера-Кона [12-13], N=2,3,4, $H^{(3)}_{\Gamma_6}\left(\vec{k}\right)$ – кубическое по волновому вектору дырок $\left(\vec{k}\right)$ слагаемое в $H^{(N)}_{\Gamma_6}\left(\vec{k}\right)$. В частности, для полупроводников кубической симметрии $H^{(3)} = D'\vec{J}\vec{K}$, $K_\alpha = k_\alpha\left(k^2_{\alpha+1} + k^2_{\alpha+2}\right)$, J_α – матрицы оператора углового момента в представлении Γ_8 [12-13], D' – зонный параметр полупроводника, н-р, для p-GaAs $D' = 3.9\times10^{-23}$ eVsm^3.

Отметим здесь, что вклад одновременного поглощения трех фотонов в коэффициент поглощения света или линейно-циркулярного дихроизма не исследован в работах [2, 3, 7-11], т.е. пренебрегали последним слагаемым в (1).

Если рассматривать оптические переходы, происходящие при поглощении трех отдельных фотонов, описываемых диаграммой , тогда поляризационная зависимость матричного элемента оптического перехода типа $|+3/2\rangle\to|m\rangle\to|m'\rangle\to|+1/2\rangle$ выражается как

$$2\sqrt{3}\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^3 \frac{(Bk)^3}{(\hbar\omega)^2} e'_+\left(4|e_{z'}|^2 - \frac{3}{8}|e'_+|^2\right),$$

где по номерам промежуточных состояний $|m\rangle$, $|m'\rangle$ проводится суммирование. Матричный элемент трехфотонного оптического перехода типа , где сначала поглощается один фотон, а далее одновременно поглощаются два фотона, имеет вид:

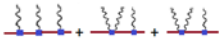
$$-\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^3 \frac{B^2k}{\hbar\omega} e'_+\left\{\left[2\left(\frac{A}{B}-1\right) + 2e'^2_z + \frac{1}{2}e'^2_\perp\right] - 4\left(\frac{A}{B}-1\right)e'^2_z\right\}.$$

Матричный элемент оптического перехода типа , где сначала одновременно поглощаются два фотона, а далее поглощается один фотон, и матричный элемент оптического перехода типа  с одновременным поглощением трех фотонов определяются аналогичным образом.

Сумма матричных элементов последних двух переходов выражается как

$$-\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^3 \frac{B^2k}{\hbar\omega} e'_+\left(10e'^2_z - e'^2_\perp\right).$$

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

В результате поляризационная зависимость суммы всех трехфотонных оптических переходов, описываемых диаграммой , выражается как

$$\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^3\frac{B^2k}{\hbar\omega}e'_+\times$$
$$\times\left[\left(-10e_z'^2+e_\perp'^2\right)+4\frac{Bk^2}{\hbar\omega}\left(4\left|e_{z'}\right|^2-\frac{3}{8}\left|e'_+\right|^2\right)\right].$$

Если учтем закон сохранения энергии в трехфотонных оптических переходах и $e_\perp'^2=\left|e'_+\right|^2$, тогда последнее выражение принимает вид:

$$-\frac{\sqrt{3}}{8}\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^3\frac{B^2k}{\hbar\omega}e'_+\left(136e_z'^2-13e_\perp'^2\right).$$

Тогда квадрат модуля трехфотонных оптических переходов типа  имеет вид:

$$\left\{\left|M^{(1-1-1)}_{+1/2;+3/2}\right|^2+\left|M^{(1-1-1)}_{-1/2;-3/2}\right|^2\right\}=\left(\frac{eA_0}{c\hbar}Bk\right)^3\frac{24}{(\hbar\omega)^4}\left\{\left|e'_+\left(4\left|e_{z'}\right|^2-\frac{3}{8}\left|e'_+\right|^2\right)\right|^2+\left|e'_-\left(4\left|e_{z'}\right|^2-\frac{3}{8}\left|e'_-\right|^2\right)\right|^2\right\}. \quad (2)$$

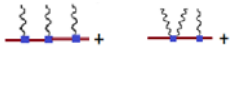
После проведения углового усреднения по телесному углу волнового вектора дырок имеем: для линейной поляризации

$$\left\langle\left\{\left|M^{(1-1-1)}_{+1/2;+3/2}\right|^2+\left|M^{(1-1-1)}_{-1/2;-3/2}\right|^2\right\}\right\rangle_{\text{lin.pol}}=\frac{297}{4}\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^6B^3\frac{1}{\hbar\omega}$$

для циркулярной поляризации

$$\left\langle\left\{\left|M^{(1-1-1)}_{+1/2;+3/2}\right|^2+\left|M^{(1-1-1)}_{-1/2;-3/2}\right|^2\right\}\right\rangle_{\text{circ.pol.}}=\frac{405}{16}\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^6\frac{B^3}{\hbar\omega}.$$

Из последних соотношений видно, что коэффициент трехфотонного линейно-циркулярного дихроизма, когда фотоны поглощаются по отдельности, равен $\eta^{(1-1-1)}_{\pm1/2;\pm3/2}=44/15$.

Квадрат модуля поляризационной зависимости суммарных матричных элементов оптических переходов типа  принимает вид

$$\sum_{m=\pm3/2;m'=\pm1/2}\left|M^{(3)}_{m,m'}\right|^2=\frac{3}{4}\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^6\left(\frac{B^2k}{\hbar\omega}\right)^2\left\{e_\perp'^2\left[\left(-10e_z'^2+e_\perp'^2\right)-6\left(4\left|e_{z'}\right|^2-\frac{3}{8}\left|e_\perp'\right|^2\right)\right]^2+\right.$$
$$\left.+4\frac{\hbar\omega}{B^2k}D'\left(34e_\perp'^2e_z'^4-\frac{13}{4}e_\perp'^4e_z'^2\right)+4\left(\frac{\hbar\omega D'}{B^2k}\right)^2\left(\left|e_\perp'\right|^2e_z'^4+\left|e_\perp'\right|^2e_y'^2e_x'^2\right)\right\}. \quad (3)$$

Тогда усредняя последние соотношения по волновому вектору дырок, получим: для линейной поляризации

$$\left\langle\sum_{m=\pm3/2;m'=\pm1/2}\left|M^{(3)}_{m,m'}\right|^2\right\rangle_{\text{linear}}=\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^6\left(\frac{B^2k}{\hbar\omega}\right)^2\left[21.5+4.9\frac{\hbar\omega}{B^2k}D'+0.5\left(\frac{\hbar\omega D'}{B^2k}\right)^2\right], \quad (4)$$

для циркулярной поляризации

$$\left\langle\sum_{m=\pm3/2;m'=\pm1/2}\left|M^{(3)}_{m,m'}\right|^2\right\rangle_{\text{circ}}=\left(\frac{eA_0}{c\hbar}\right)^6\left(\frac{B^2k}{\hbar\omega}\right)^2\left[22.5+7.8\frac{\hbar\omega}{B^2k}D'+0.49\left(\frac{\hbar\omega D'}{B^2k}\right)^2\right]. \quad (5)$$

III. Четырехфотонный линейно-циркулярный дихроизм

Ниже рассмотрим четырехфотонное поглощение поляризованного излучения в полу-

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

проводниках кубической симметрии, обусловленное прямыми оптическими переходами между подзонами легких и тяжелых дырок, где, в отличие от [1-9], учтем одновременное поглощение трех фотонов. Тогда четырех-фотонный матричный элемент оптических переходов между подзонами тяжелых и легких дырок валентной зоны полупроводника определяется соотношением:

$$M^{(4)}_{m\vec{k},m'\vec{k}} = M^{(4)}_{m,m'} = \sum_{m''',m''=\pm1/2,\pm3/2}\left(\frac{M^{(1)}_{m,\tilde{m}} M^{(1)}_{\tilde{m},m'''} M^{(1)}_{m''',m''} M^{(1)}_{m'',m'}}{\left(E_{\tilde{m}\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - \hbar\omega\right)\left(E_{m'''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - \hbar\omega\right)\left(E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - \hbar\omega\right)} + \right.$$
$$+ \frac{M^{(1)}_{m',m'''} M^{(1)}_{m''',m''} M^{(2)}_{m'',m'}}{\left(E_{m'''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - 3\hbar\omega\right)\left(E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - 2\hbar\omega\right)} + \frac{M^{(1)}_{m',m'''} M^{(2)}_{m''',m''} M^{(1)}_{m'',m'}}{\left(E_{m'''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - 3\hbar\omega\right)\left(E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - \hbar\omega\right)} +$$
$$+ \frac{M^{(2)}_{m',m'''} M^{(1)}_{m''',m''} M^{(1)}_{m'',m'}}{\left(E_{m'''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - 2\hbar\omega\right)\left(E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - \hbar\omega\right)} + \frac{M^{(2)}_{m,m''} M^{(2)}_{m'',m'}}{\left(E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - 2\hbar\omega\right)} + \frac{\tilde{M}^{(3)}_{m,m''} M^{(1)}_{m'',m'}}{E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - \hbar\omega} +$$
$$\left. + \frac{M^{(1)}_{m,m''} \tilde{M}^{(3)}_{m'',m'}}{E_{m''\vec{k}} - E_{m'\vec{k}} - 3\hbar\omega}, \right. \qquad (6)$$

где $|m\rangle = |c, \pm 1/2\rangle$, E_g – ширина запрещенной зоны, а закон сохранения энергии для указанных ОП выражается с помощью функции $\delta\left(E_c - E_{lh} - 2\hbar\omega\right)$.

IV. Заключение

Отметим, что волновой вектор в конечном состоянии электронов, участвующих в межзонных ОП, определяется с помощью выражения $k^{(2\omega)}_{c,L} = \sqrt{\frac{2\mu^{(c,L)}_{+}}{\hbar^2}\left(2\hbar\omega - E_g\right)}$, где $L=lh$ ($L=hh$) – для легких (тяжелых) дырок, $\mu^{(c,L)}_{+} = \frac{m_c m_L}{m_c + m_L}$ – приведенная эффективная масса носителей тока, m_c – эффективная масса элект-ронов в зоне проводимости, m_L – эффективная масса дырок в подзоне L. Тогда для энергий легких и тяжелых дырок справедливы следующие соотношения:

а) если ОП происходит из подзоны тяжелых дырок, тогда

$$E_{L=hh}(k^{(2\omega)}_{c,L=hh}) = \frac{m_c}{m_c + m_{hh}}\left(2\hbar\omega - E_g\right),$$

$$E_{lh}(k^{(2\omega)}_{c,L=hh}) = \frac{m_c m_{hh}}{m_{lh}\left(m_c + m_{hh}\right)}\left(2\hbar\omega - E_g\right);$$

б) если ОП происходит из подзоных легких дырок, тогда

$$E_{L=hh}(k^{(2\omega)}_{c,L=lh}) = \frac{m_c m_{lh}}{m_{hh}\left(m_c + m_{lh}\right)}\left(2\hbar\omega - E_g\right),$$

$$E_{lh}(k^{(2\omega)}_{c,L=lh}) = \frac{m_c}{m_c + m_{lh}}\left(2\hbar\omega - E_g\right).$$

Таким образом, в узкозонном кристалле были классифицированы межзонные трех и четырех фотонные ОП и получены выражения для матричных элементов в зависимости от зонных параметров, степени поляризации и частоты света.

Метаданные

On the theory of three and four photon linear-circular dichroism in p-GaAs

R.Ya. Rasulov[1], V.R. Rasulov[1], I. Eshboltaev[2], M.Kh. Kuchkarov[2]

[1]Ferghana State University, Murabbiylar str. 19, 150100, Fergana, Uzbekistan
[2]Kokand State Pedagogical Institute, Turon str. 19, 150700, Kokand, Uzbekistan

Matrix elements of three- and four-photon optical transitions between subbands of the valence band of a semiconductor of cubic symmetry are calculated. In this case, the contribution of the simultaneous three-photon interaction to the total matrix element of three- and four-photon optical transitions is taken into account, and it is shown that this contribution depends on both the sign and the numerical value of the parameter of the term cubic in the hole wave vector in the effective Hamiltonian.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Keywords: three- and four-photon optical transitions, initial, virtual and final states, total matrix element, effe ctive Hamiltonian, linear-circular dichroism, law of conservation of energy in three-photon optical transitions.

Литература (References)

[1] S.D. Ganichev, E.L. Ivchenko, R.Ya. Rasulov, I.D. Yaroshetskiy,B.Ya. Averbukh. Linear-circular dichroism toka uvlecheniya pri nelineynom mezhpodzonnom poglosh'enii sveta v *p*-Ge. FTT **35**, 198 (1993).

[2] R.Ya. Rasulov. Effekt uvlecheniya pri trekhfotonnom poglosh;enii sveta v poluprovodnikakh tipa Ge. FTT **22**, 11, 2077 (1988).

[3] R.Ya. Rasulov, G.Kh. Khoshimov, Kh. Kholitdinov. Linear-circular dichroism of nonlinear light absorption in *n*-GaP. Semiconductors **30**, 2, 274 (1996).

[4] V.R. Rasulov, R.Ya. Rasulov, I. Eshboltaev. Linearly and circular dichroism in a semiconductor with a complex valence band with allowance for four-photon absorption of light. Physics of the Solid State **59**, 3, 463 (2017).

[5] D.A. Parshin, A.R. Shabaev. Teoriya nelineynogo poglosh'eniya infrakrasnogo izlucheniya v poluprovodnikakh s vyrozhdennymi zonami. JETF **92**, 4, 1471 (1987).

[6] E.L. Ivchenko. Dvukhfotonnoe poglosh'enie sveta i opticheskaya orientatsiya svobodnykh nositeley. FTT **14**, 11, 3489 (1972).

[7] S.B. Arifzhanov, A.M. Danishevskiy, E.L. Ivchenko, S.F. Kochegarov, V.K. Subashiev. Rol' razlichnykh tipov perekhodov pri trekhfotonnom poglosh'enii v InAs. JETF **74**, 1, 172 (1978).

[8] N.V. Leppenen, E.L. Ivchenko, L.E. Golub. Nonlinear absorption and photocurrent in weyl semimetals. Physica Status Solidi (b) **129**, 139 (2019).

[9] E.L. Ivchenko, R.Ya. Rasulov. Simmetriya i real'naya zonnaya struktura poluprovodnikov (Tashkent, Fan, 1989).

[10] G.L. Bir, G.E. Pikus. Simmetriya i deformatsionnye effekty v poluprovodnikakh (Moskva, Media, 2012).

P-GaAs да уч ва тўрт фотонли чизиқли циркуляр дихроизм назарияси тўғрисида

Р.Я. Расулов[1], В.Р. Расулов[1], И. Эшболтаев[2], М.Х. Кучкаров[2]

[1]Фарғона давлат университети, Мураббийлар кўч. 19, 150100, Фарғона, Ўзбекистон

[2]Қўқон давлат педагогика институти, Турон кўч. 19, 150700, Қўқон, Ўзбекистон

Куб симметрияли яримўтказгич валент зонасининг тармоқлариаро уч ва тўрт фотонли оптик ўтишлар матрицавий элементлари ҳисобланган. Бунда уч ва тўрт фотонли оптик ўтишларнинг таркибий матрица элементига бир вақтнинг ўзида уч фотонли ўзаро таъсирнинг қўшган ҳиссаси эътиборга олинган ҳамда бу улушнинг самаравий гамильтониандаги коваклар тўлқин вектори кубинчи даражали ҳад олд коэффициентининг сон қиймтига, ҳам ишорасига боғлиқ эканлиги кўрсатилган.

Калит сўзлар: уч ва тўрт фотонли оптик ўтишлар, бошланғич, виртуал ва якуний ҳолатлар, матрица элементлар, самаравий гамильтониан, чизиқли циркуляр дихроизм коэффициенти, уч фотонли оптик ўтишларда энергиянинг сақланиш қонуни.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Fermi approach to the dimension effect of multiple exciton generation in nanostructures

M.B. Marasulov[*,1], N.N. Turaeva[2], B.L. Oksengendler[1,3]

[1]Institute of Polymer Chemistry and Physics, Uzbekistan Academy of Sciences, A. Kadiry str. 7-b, 100128, Tashkent, Uzbekistan
[2]Webster University, USA470 E. Lockwood Ave. St. Louis, MO 63119, USA
[3]Arifov Institute of Ion-plasma and Laser Technologies of Uzbekistan Academy of Sciences. Durmon yuli st. 33, 100125, Tashkent, Uzbekistan

Received 02.06.2021

* Corresponding author: e-mail: polymer@academy.uz, Phone: +998(71)241-85-94

Эффект множественной генерации экситонов в низкоразмерных наноструктурах одним фотоном представляет собой возможный путь к повышению эффективности фотоэлектрического преобразования. В этой работе статистическая теория Ферми генерации сильно коррелированных частиц используется для объяснения размерного эффекта генерации множественных экситонов в наностержнях PbSe по сравнению с квантовыми точками. Статистический подход, учитывающий разницу в пороговых энергиях фотонов для размножения носителей в наностержнях по сравнению с квантовыми точками, дает хорошее согласие с экспериментальными значениями квантовых эффективностей.

Ключевые слова: размерность, множественная генерация экситонов, PbSe, квантовые точки, наностержни, теория Ферми.

The effect of multiple exciton generation in low dimensional nanostructures by a single photon presents a possible route to improved photovoltaic conversion efficiency. In this work, the Fermi`s statistical theory of the generation of strongly correlated particles is used to explain the dimensional effect of the generation of multiple excitons in PbSe nanorods versus quantum dots. The statistical approach taking into account the difference in threshold photon energies for carrier multiplication of nanorods versus quantum dots gives a good agreement with the experimental values of quantum efficiencies.

Keywords: dimension, multiple exciton generation, PbSe, quantum dots, nanorods, Fermi theory.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.286

I. Introduction

One of the remarkable nanoeffects occurring in semiconducting nanocrystals is the generation of multiple electron-hole pairs (excitons) upon the absorption of a single photon [1-8]. The effect called Multiple Exciton Generation (MEG) or Carrier Multiplication (CM) is potentially promising to increase the efficiency of solar energy conversion, particularly in photovoltaics and photocatalysis. The Shockley-Queisser (SQ) detailed balance analysis limits the power conversion efficiency to 33% for a single light-absorbing layer. However, the generation of multiple excitons upon the absorption of a single photon could potentially increase the power conversion efficiency to above 40% [3, 7]. The effect was first observed in bulk semiconductors [9] when a hot electron in the conduction band collides and forces a valence electron to promote across the bandgap, but its probability is very low due to the fast relaxation and phonon emissions. In semiconducting nanocrystals, due to the quantum confinement of electrons and holes, phonon emissions are suppressed, and conservation of translational momentum is relaxed. As a re-

sult, the threshold photon energy E_{th} at which the quantum yield (QY) for exciton generation begins to exceed unity, and the energy of creation of an electron-hole pair $\varepsilon_{e\text{-}h}$ which is the excess photon energy required to generate an additional electron-hole pair after the threshold photon energy, are reduced, and the quantum efficiency of the MEG effect is enhanced.

The first experimental observation of MEG was reported in different quantum dots, including PbSe [1], PbS [2, 6], PbTe [10], Si [5], CdSe [4], InAs [11, 12]. Many theoretical investigations [13-19] followed the experiments to explain the MEG effect. The QYs measured initially by different research groups in identical materials were contradictory [8, 20-23]. These discrepancies were explained by the uncontrolled photocharging of nanocrystals due to the longer lifetime of the photoionized state compared to the time between laser pulses. After eliminating photocharging effects, it was established a good agreement between data obtained by different spectroscopic techniques [20, 21].

Usually, the QYs measurements [24] can be plotted versus $h\nu/E_g$, where $h\nu$ is the photon energy, E_g is the bandgap energy, and the efficiency of an electron-hole pair multiplication $\eta_{e\text{-}h}$ is then obtained from the following relationship between the QY and $h\nu/E_g$ for $h\nu>E_{th}$:

$$\mathrm{QY} = \left(\frac{h\nu}{E_g} - 1 \right) \eta_{e-h} . \qquad (1)$$

At the limit of the efficiency of exciton generation equal to 1, the amount of excess energy needed to produce an additional electron-hole pair is the bandgap energy E_g. For this case, the plot QY vs $h\nu/E_g$ have a "staircase" shape. In reality, the amount of energy for an electron-hole pair creation is greater than the bandgap energy because some excess energy is lost as heat. Since $\eta_{e\text{-}h}$ is defined as the bandgap energy divided by the actual energy of electron-hole pair creation $\eta_{e\text{-}h} = E_g/\varepsilon_{e\text{-}h}$, $\eta_{e\text{-}h}$ is less than 1.

We can compare the values of the efficiency of an electron-hole pair generation for bulk and QDs, for example, for bulk PbSe $\eta_{e\text{-}h}$ = 0.2 while for PbSe QDs $\eta_{e\text{-}h}$ = 0.4 or for bulk Si $\eta_{e\text{-}h}$ = 0.4 and for Si QDs $\eta_{e\text{-}h}$ = 0.9 [24]. In nearly all cases, the efficiencies for the QDs are higher than those for bulk semiconductors. Note here, that the efficiency of exciton generation of (6,5) SWCNTs is equal to 0.7, which is also very promising [25]. In general, two important factors of the MEG effect, the threshold photon energy and the energy of an electron-hole pair creation, are both reduced in QDs compared to those in bulk counterparts and responsible for the enhanced MEG effect in QDs.

The enhancement of the MEG effect due to the reduction of the energy of an electron-hole pair creation is especially promising to obtain an appreciable improvement in the power conversion efficiency of practical devices. As it was shown [24], the smaller energy of an electron-hole pair creation corresponding to stronger MEG can be achieved either by slowing the intra-band energy loss or enhancing Coulomb interactions responsible for exciton-generating collisions.

The dimension of nanostructures is chosen as one of the factors to boost further the MEG performance in PbS and PbSe nanoparticles. According to CM measurements [26-27], multiexciton yield shows an approximately two-fold increase from ~11% in PbSe QDs to ~25% for nanorods for the aspect ratio of ~7. It was shown that at similar threshold photon energy, nanorods exhibited a two-fold reduction of the energy of an electron-hole pair creation over QDs attributed to increased Coulombic coupling in the quasi-1D structure at the optimal aspect ratio of 6-7 [26-27]. At those optimal aspect ratios, the energy of an electron-hole pair creation $\varepsilon_{e\text{-}h}$ in PbSe nanorods is 2.7 E_g and the CM threshold E_{th} is 2.6 E_g, while in PbSe QDs they are 4 E_g and 2.7 E_g [26-27], respectively. It was supposed that decreasing the quantum efficiency at larger aspect ratios is likely due to the restored 1D translational momentum conservation which imposes additional restrictions on the CM process [26-27].

II. Multiple Exciton Generation models

A few models interpret the CM effect in QDs [15-19]. In the impact ionization model [15] the CM was considered inverse with respect to Auger recombination of biexciton states into a single exciton state. Therefore, two time constants should be comparable, or the CM should proceed even slower than that of the Auger decay. However, the transient absorption (TA) data shows that the characteristic CM time is much shorter (<50–200 fs) than the Auger recombination time (~300 ps) indicating that CM is probably not an Auger type process.

According to the coherent CM model [16], due to the superposition of a single-exciton and coherent

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

multi-exciton states, coherent oscillations between various resonant-exciton and multi-exciton states should be established. These oscillations were not experimentally detected, instead, the 1S-state build-up is dominated by the intraband relaxation process.

Schaller and et al. [17] showed, that due to the instantaneous character (~200 fs) of generation of multiexcitons they interpreted the MEG in terms of their direct photogeneration of multiexcitons by a single photon via virtual single exciton states. Second-order perturbation theory was applied to the generation of biexciton by a single photon via a virtual single-exciton state by using the electron-electron Coulomb interaction coupling matrix. While coherent CM occurs in the regime of strong exciton-to-biexciton Coulomb coupling, the perturbation approach is valid for the situation of weak to moderate coupling. Although the perturbation theory was applied for the generation of biexcitons, for the processes of high multiplicity it could be problematic [27] due to the strong correlation of multiple excitonic states in the confined space. From another side, it was well-known [28, 29] that for the processes of multiple generation of strongly correlated particles statistical approaches give a more realistic description. The statistical theory developed by Fermi [29-31] was originally developed for the generation of π-mesons at nucleon-nucleon collisions. Due to the large values of interaction constant of the nucleons with π-meson field, for the analysis of the process of generation of π-mesons, the perturbation theory was not justified to be used [28]. Instead, it was supposed that the energy released at nucleon-nucleon collision was instantaneously distributed according to the statistical laws between various degrees of freedom available in the given effective volume. This approach was assumed to be an extreme case inverse to the perturbation theory and a good approximation of the real picture, especially at high energies. In our previous works [18, 19], we used the Fermi statistical approach to the MEG effect in QDs, by assuming the energy of generation of an electron-hole pair to be equal to the energy of semiconductor bandgap (E_g), which is an ideal case of generation of particles without energy losses. With such an assumption, almost ideal high multiplicities were obtained in PbSe QDs [19], which did not correspond to the data on CM observed in the recent experiments [24-27]. In this work, the statistical approach was modified using the real threshold photon energy and additional electron-hole pair creation energy calculated from the experiments [26, 27] to explain the dimensionality effect of CM efficiencies. We compare the quantum efficiencies of MEG in PbSe nanorods versus quantum dots calculated within the Fermi approach with the corresponding experimental results [24-27].

III. Dimension effect in the Fermi approach

By applying Fermi`s statistical theory [29] to the MEG effect, we can suppose, that a high-energetic photon $h\nu >> E_g$ is absorbed in the volume of nanoparticles and is rapidly distributed among the various degrees of freedom present in the system, so that n electrons and holes ($n/2$ excitons) are generated. By neglecting the conservation of momentum, the expression for the probability of generation of n particles with a certain energy distribution in the effective volume Ω can be written as

$$S(n) = \frac{m_0^{3n/2}\Omega^n}{2^{3n/2}\pi^{3n/2}\hbar^{3n}} \frac{T^{(3n/2)-1}}{((3n/2)-1)!}. \qquad (2)$$

Here, m_0 is the free electron mass; $n = 2, 4, 6, ...$ is the number of particles (electrons and holes); T is the total kinetic energy of generated particles. The relative probability of generation of n particles is then determined as

$$W(n) = \frac{S(n)}{\Sigma_n S(n)}. \qquad (3)$$

The QY of CM upon absorption of a single photon is calculated as $QY = \langle N_{e-h} \rangle \times 100\%$, where $\langle N_{e-h} \rangle$ is the average number of electron-hole pairs calculated via statistical weights

$$\overline{n} = 2\langle N_{e-h} \rangle = \frac{\Sigma_n n S(n)}{\Sigma_n S(n)}. \qquad (4)$$

In general, according to the model (Eq. 2), two parameters, the effective volume and the kinetic energy of the particles, vary with the size and shape of nanoparticles. Therefore, the dimension effect observed in experiments [26, 27] can be interpreted based on different values of the effective volume of nanorods versus QDs and the kinetic energy of the particles generated in that volume. The effective volume of QDs is calculated using $\Omega = (3/4)\pi R^3$ and for nanorods it is defined from $\Omega = \pi R^2 L_{eff}$, in which L_{eff} is the effective length of the nanorod, which for PbSe is taken at optimal aspect ratios of 6-7, at which the CM efficiency was maximal [26].

As it was mentioned above, a threshold photon energy, above which QYs begin to exceed 1, and energy of electron-hole pair creation in nanorods is smaller than those in QDs, so in the nanorods, the ki-

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

netic energy of the particles should be greater. Thus, the higher efficiency of MEG in PbSe nanorods established from the experiments [27] over QDs at similar bandgap energy can be explained due to the higher values of the effective volume in which multiple particles are created and their total higher kinetic energy. Estimations of QYs for PbSe nanorods and QDs can be made using Eqs. (2, 4). The statistical weight of generation of a single exciton is calculated by using the following formula

$$S(2) = \frac{m_0^3 \Omega^2}{8\pi^3 \hbar^6} \frac{T^2}{5!}. \quad (5)$$

The statistical weight of generation of biexciton is then equal to

$$S(4) = \frac{m_0^6 \Omega^4}{64\hbar^{12}} \frac{T_1^5}{5!}. \quad (6)$$

The kinetic energy of a single exciton generated upon excitation by a high energetic photon (Fig. 1) is calculated from the formula

$$T = h\nu - E_g + E_{exc}. \quad (7)$$

Here E_{exc} is the exciton potential energy. When the photon energy is higher the threshold, an additional exciton is generated, and the kinetic energy of two excitons (Fig. 1) can be calculated based on the following formula

$$T_1 = T - E_{th} + E_{exc}. \quad (8)$$

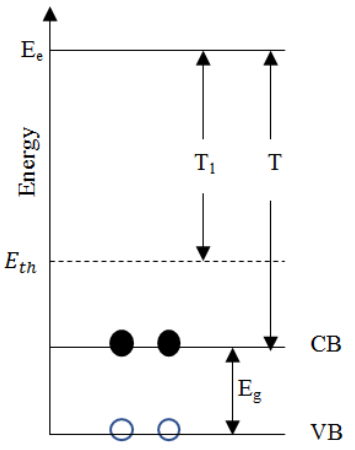


Figure 1. The kinetic energies of a single exciton (T) and biexciton (T_1) are determined via the excitation electron energy (E_e), the bandgap energy (E_g), and the threshold photon energy (E_{th}) The exciton binding energy is not shown.

IV. Results

CM efficiencies in PbSe nanorods and QDs with similar diameter and effective bandgap were calculated using Eq. 4. We compared the theoretical results for nanorods and QDs of three different diameters (2.7 nm, 3.7 nm, and 4.7 nm) with the corresponding experimental ones at 3.1 eV excitation. It was shown (Table 1 and 2) that a good agreement of theoretical results of CM efficiencies for the two types of nanoparticles (d=2.7 nm, and 3.7 nm) with the corresponding experimental data was obtained using the CM threshold photon energy of E_{th}=2.7E_g for QDs, and E_{th}=2.6E_g for nanorods established in the experiments [26, 27]. For the largest nanoparticles (d=4.7 nm) (Table 3), the agreement with the experiments was achieved using E_{th}=3.1E_g. In the calculations of effective volumes of nanorods, the optimal aspect ratio of nanorods (AS=7) was used, at which the CM efficiency was maximal. Based on the dielectric formalism [32], the Coulomb interaction in an electron-hole pair can be approximately defined by the sum of polarizing waves with different wavenumbers, and therefore we assume that the dielectric constant in QDs and nanorods should be smaller than that in bulk semiconductors. Therefore, we chose the arbitrary values for Coulomb interaction energy in the electron-hole pair in PbSe nanorods and QDs which match the model with the experiments.

Note that its value in the nanoparticles is larger than that in bulk PbSe. Moreover, it can be seen from Tables 1-3, the chosen exciton energies inversely correlate with the diameter of the particles.

Table 1. PbSe QDs and nanorods with 2.7 nm in diameter and 0.89 eV bandgap energy.

n	$S(n)$	$\langle N_{e\text{-}h}\rangle_{theor}$	$\langle N_{e\text{-}h}\rangle_{exp}$ [27]
QDs: E_{th}=2.7 E_g; E_{exc}=0.4 eV			
2	2.06×10^{22}	1.16	1.15
4	4.02×10^{21}		
Nanorods: E_{th}=2.6 E_g; L=7×2.7 nm=18.9 nm; E_{exc}=0.4 eV			
2	1.66×10^{24}	1.38	1.30
4	9.84×10^{23}		

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

Table 2. PbSe QDs and nanorods with 3.7 nm in diameter and 0.81 eV bandgap energy.

n	$S(n)$	$\langle N_{e\text{-}h}\rangle_{theor}$	$\langle N_{e\text{-}h}\rangle_{exp}$ [27]
QDs: E_{th}=2.7 E_g; E_{exc}=0.17 eV			
2	1.21×10^{23}	1.23	1.22
4	3.65×10^{22}		
Nanorods: E_{th}=2.6 E_g; L=7×3.7 nm=25.9 nm; E_{exc}=0.02 eV			
2	1.18×10^{25}	1.55	1.5
4	1.47×10^{25}		

Table 3. PbSe QDs and nanorods with 4.7 nm in diameter and 0.66 eV bandgap energy.

n	$S(n)$	$\langle N_{e\text{-}h}\rangle_{theor}$	$\langle N_{e\text{-}h}\rangle_{exp}$ [27]
QDs: E_{th}=3.1 E_g; E_{exc}~0 eV			
2	5.0×10^{23}	1.4	1.50
4	3.58×10^{23}		
Nanorods: E_{th}=2.6 E_g; L=7×4.7 nm=32.9 nm; E_{exc}=0 eV			
2	5.52×10^{25}	1.89	1.80
4	4.34×10^{26}		

V. Conclusion

The statistical model is presented to explain the dimensionality effect on CM established in the experiments [26, 27]. According to the model, the larger kinetic energy due to the smaller energy threshold of CM results in higher quantum yields of MEG in nanorods compared to those in QDs which is in good agreement with the experiments. The model takes into account the enhancement of exciton energy in low dimensional nanostructures. It can be used to estimate the CM efficiency in 0D and 1D nanostructures based on the photon energy threshold and energy of the creation of additional electron-hole pairs above the energy threshold.

Литература (References)

[1] R.D. Schaller, V.I. Klimov. High-efficiency carrier multiplication in PbSe nanocrystals: Implications for solar energy conversion. Phys. Rev.Lett. **92**, 186601 (2004).

[2] R.J. Ellingson, M.C. Beard, J.C. Johnson, et al. Highly efficient multiple exciton generation in colloidal PbSe and PbS quantum dots. Nano Lett. **5**, 865-871 (2005).

[3] M.C. Hanna, A.J. Nozik. Solar conversion efficiency of photovoltaic and photoelectrolysis cells with carrier multiplication absorbers, J. Appl. Phys. **100**, 1-8 (2006).

[4] R.D. Schaller, M.S. Petruska, V.I. Klimov. Effect of electronic structure on carrier multiplication efficiency: Comparative study of PbSe and CdSe nanocrystals. Appl. Phys. Lett. **87**, 253102 (2005).

[5] M.T. Trinh, R. Limpens, W.D.A.M. de Boer, et al. Direct generation of multiple excitons in adjacent silicon nanocrystals revealed by induced absorption. Nat. Photonics **6**, 316-321 (2012).

[6] F. Gesuele, M.Y. Sfeir, W.K. Koh, et al. Ultrafast supercontinuum spectroscopy of carrier multiplication and biexcitonic effects in excited states of PbS quantum dots. Nano Lett. **12**, 2658-2664 (2012).

[7] V.I. Klimov. "Detailed-balance power conversion limits of nanocrystal-quantum-dot solar cells in the presence of carrier multiplication. Appl. Phys. Lett. **89**, 123118-123113 (2006).

[8] G. Nair, M.G. Bawendi. Carrier multiplication yields of CdSe and CdTe nanocrystals by transient photoluminescence spectroscopy. Phys. Rev. B **76**, 081304 (2007).

[9] P.T. Landsberg. Recombination in Semiconductors (Cambridge University Press, Cambridge, 1991).

[10] J.E. Murphy, M.C. Beard, A.G. Norman, et al. PbTe colloidal nanocrystals: Synthesis, characterization, and multiple exciton generation. J. Am. Chem. Soc., 128 (10), 3241-3247 (2006).

[11] R.D. Schaller, J.M. Pietryga, V.I. Klimov. Carrier multiplication in InAs nanocrystal quantum dots with an onset defined by the energy conservation limit. Nano Lett. **7**, 3469-3476 (2007).

[12] J.J.H. Pijpers, E. Hendry, M.T.W. Milder, et al. Carrier multiplication and its reduction by photodoping in colloidal InAs quantum dots. J. Phys. Chem. C **111**, 4146-4152 (2007).

[13] E. Rabani, R. Baer. Theory of multiexciton generation in semiconductor nanocrystals. Chem. Phys. Lett. **496**, 227-235 (2010).

[14] G. Allan, C. Delerue. Role of impact ionization in multiple exciton generation in PbSe nanocrystals. Phys. Rev. B **73**, 205423 (2006).

[15] M. Califano, A. Zunger, A. Franceschetti. Direct carrier multiplication due to inverse Auger scattering in CdSe quantum dots. Appl. Phys. Lett. **84**, 2409 (2004).

[16] W.M. Witzel, A. Shabaev, C.S. Hellberg, et al. Quantum simulation of multiple-exciton generation in a nanocrystal by a single photon. Phys. Rev. Lett. **105**, 137401 (2010).

[17] R.D. Schaller, V.M. Agranovich, V.I. Klimov. High-efficiency carrier multiplication through direct photogeneration of multi-excitons via virtual single-exciton states. Nature Physics **1**, 189-194 (2005).

[18] B.L. Oksengendler, N.N. Turaeva, S.S. Rashidova. Statistical theory of multiple exciton generation in quantum dot solar cells. Applied Solar Energy **45**, (3), 162-165 (2009).

[19] B.L. Oksengendler, N.N. Turaeva, S.S. Rashidova. Advanced theory of multiple exciton generation effect in quantum dots. The Eur. Phys. J. B **85**, 218 (2012).

[20] J.A. Mc Guire, J. Joo, J.M. Pietryga, R.D. Schaller, V.I. Klimov. New aspects of carrier multiplication in semicon-

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

ductor nanocrystals. Acc. Chem. Res. **41**, (12), 1810-1819 (2008).
[21] J.A. McGuire, M. Sykora, J. Joo, J.M. Pietryga, V.I. Klimov. Apparent versus true carrier multiplication yields in semiconductor nanocrystals. Nano Lett. **10**, (6), 2049-2057 (2010).
[22] M.C. Beard, A.G. Midgett, M. Law, et al. Variations in the quantum efficiency of multiple exciton generation for a series of chemically treated PbSe nanocrystal films. Nano Lett. **9**, 836-845 (2009).
[23] R. Schaller, M. Sykora, J.M. Pietryga, V.I. Klimov. Seven excitons at a cost of one: Redefining the limits for conversion efficiency of photons into charge carriers. Nano Lett. **6**, 424-429 (2006).
[24] M.C. Beard. Multiple exciton generation in semiconductor quantum dots. J. Phys. Chem. Lett. **2**, 1282-1288 (2011).
[25] S.J. Wang, M. Khafizov, X.M. Tu, et al. Multiple exciton generation in single-walled carbon nanotubes. Nano Lett. **10**, 2381-2386 (2010).
[26] L.A. Padilha, J.T. Stewart, R.L. Sandberg, et al. Aspect ratio dependence of Auger recombination and carrier multiplication in PbSe nanorods. Nano Lett. **13**, 1092-1099 (2013).
[27] L.A. Padilha, J.T. Stewart, R.L. Sandberg, et al. Carrier multiplication in semiconductor nanocrystals: influence of size, shape, and composition. Accounts of Chemical Research **46**, (6), 1261-1269 (2013).
[28] H.W. Lewis, J.R. Oppenheimer, S.A. Wouthuysen., The multiple productions of mesons. Phys. Rev. **73**, 127 (1948).
[29] E. Fermi. High energy nuclear events. Progress of Theoretical Physics **5**, (4), 570-583 (1950).
[30] E.L. Feĭnberg. Multiple generation of hadrons and statistical theory. Soviet Physics Uspekhi **14**(4), 455-483 (1972).
[31] I.M. Pukhov, D.S. Chernavskii. On phase instability in the case of scattering by a random potential. Theoretical and Mathematical Physics **7**, 487-494 (1971).
[32] J.M. Ziman. Principles of the theory of solids (Cambridge University Press, Cambridge, 1972).

Наноструктураларда кўп экситон генерациясининг ўлчам эффектига Ферми ёндашуви

М.Б. Марасулов[1], Н.Н. Тураева[2], Б.Л. Оксенгендлер[1,3]

[1]Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академияси Полимерлар кимёси ва физикаси институти, А.Қодири кўчаси 7б, 100128, Тошкент, Ўзбекистон
[2]Вебстер университети, USA470 E. Локвуд Ави. Ст. Лоуис, МО 63119, АҚШ
[3]Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академияси Ионплазма ва лазер технология институти, Дўрмон йули, 33, 100125, Тошкент, Ўзбекистон

Кичик ўлчамли наноструктураларда битта фотон билан кўп экситон генерацияси эффектини фотоэлектрик ўзгариш самародорлигини оширишнинг мумкин бўлган усулини ўзида намоён қилади. Ушбу ишда PbSe наностержен кўп экситон генерацияси ўлчам эффектини квант нуқталар билан солиштиришда Ферминиг кучли корреляция қилинган заррачалар ҳосил бўлишининг статистик назариясидан фойдаланилади. Наностерженларда квант нуқталар билан солиштирганда ташувчиларни кўпайиши учун фотон чегара энергияси фарқини хисобга олувчи статистик ёндашув квант самарадорлигининг экспериментал қийматлари билан яхши мос келади.

Калит сўзлар: Ўлчовлилик, кўп экситон генерацияси, PbSe, квант нуқталар, наностержен, Ферми назарияси

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

Спектроскопия полного тока окисленного кремния

У.Б. Шаропов[*1,2]

[1]Физико-технический институт НПО «Физика–Солнце» АН РУз, ул. Чингиз Айтматов, 2, 100084, Ташкент, Узбекистан
[2]Институт материаловедения АН РУз, ул. Чингиз Айтматов, 2, 100084, Ташкент, Узбекистан

Получена 24.11.2021.

* Corresponding author: e-mail utkirstar@gmail.com, Phone: +988 90 115 9779

В настоящей работе рассмотрены экспериментальные данные окисления поверхности кремния в вакууме при последующем отжиге, полученные методом спектроскопии полного тока. Проведенные исследования показали, что при использовании температурного отжига для очистки поверхности кремния от загрязнений есть свои плюсы и минусы. Нельзя допустить длительный отжиг при высоких температурах, который приводит к окислению кремния. А использование кратковременной вспышки можно использовать только для удаления физически (не химически) адсорбированного слоя атомов.

Ключевые слова: спектроскопия полного тока, кремний, отжиг, поверхность.

In this work, we consider the experimental data on the oxidation of the silicon surface in vacuum with subsequent annealing obtained by total current spectroscopy. Studies have shown that when using temperature annealing to clean the silicon surface from contamination, there are pluses and minuses. Prolonged annealing at high temperatures, which leads to silicon oxidation, must not be allowed. And the use of a short time flash can only be used to remove a physically (not chemically) adsorbed layer of atoms.

Keywords: total current spectroscopy, silicon, annealing, surface.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.287

I. Введение

Одним из наиболее востребованных материалов современной микро- и наноэлектроники остается монокристаллический кремний и диоксид кремния [1, 2]. Так, в последнее время, благодаря созданию квантово-размерных структур на кремнии [3-5] преодолена трудность его использования в фотоэлектронике из-за низкой вероятности излучательной рекомбинации [6-7], и тем самым получен новый импульс его широкого применения в названных областях науки и техники [8]. В производстве кремниевых интегральных схем, кроме качества структуры поверхности, большое значение имеет выбор кристаллографической ориентации кристаллов-подложек, например, плоскости (111) окисляются быстрее, чем плоскости (100), вследствие большой поверхностной плотности упаковки атомов [9-11], способных вступать в реакцию окисления [12]. Степень очистки оказывает непосредственное влияние на качество продукции, поэтому все больше микроэлектронных компаний прилагают усилия в этом направлении [13-17]. Особую важность проблема чистоты поверхности приобрела с возникновением планарной технологии [18], при которой свойства поверхности оказывают существенное влияние на параметры приборов. Знание механизма адсорбции и десорбции примесей на поверхности полупроводниковых материалов важно для проведения целенаправленного эффективного процесса очистки [19]. Также ориентационные эффекты при травлении поверхности кристаллов считаются немаловажными при

получении белого света из GaN на основе кремниевых светодиодов [20-22]. Существуют различные методы получения атомарно чистых поверхностей материалов [23-25]. Каждый из них имеет определенные преимущества и недостатки. Поэтому универсальной процедуры очистки не существует. Для каждого материала, как правило, требуется индивидуальная методика или даже комбинация нескольких методик. В настоящее время наиболее перспективным методом получения атомарно чистых поверхностей представляется низкоэнергетичное ионное и плазмохимическое травление [26]. Вместе с тем, в литературе практически не представлены исследования, в которых проводилось бы сопоставление очистки поверхности ионной бомбардировкой и электронно-спектроскопическими методами.

Большой объем исследований по очистке поверхности кристаллов кремния проведен за последние 20 лет. Изучены различные условия проведения очистки поверхности, использовались различные методы и подходы к решению поставленной задачи. Убедительно показано улучшение характеристик кристаллов кремния, необходимых для тех или иных практических применений. Тем не менее в настоящее время нет универсального оборудования и технологического процесса очистки поверхности полупроводниковых пластин, полностью удовлетворяющих всех производителей полупроводниковых изделий.

Таким образом, в производственных центрах мира при получении МДП структур перед напылением пленок, перед диффузией атомов и другими технологическими процедурами приходится проводить очистку поверхности подложки кремния от окисной пленки методом ионной бомбардировки и последующего отжига. При этом приходится много раз сталкиваться с поверхностью кремния в процессе окисления, физически и химической адсорбции газов, ионной бомбардировки, травления и последующего отжига. Сравнительное исследование спектроскопии полного тока (ПТ) кремния и оксида кремния представляет определенный интерес.

Для исследования поверхности кремниевых пластин применяют различные методы контроля. Для точного определения состояния и свойств поверхности подложек оптимально использовать комбинации нескольких методов контроля поверхности полупроводниковых пластин. Данная работа посвящена исследованию окисления поверхности кремния в вакууме методом спектроскопии ПТ с последующим отжигом. Измерения проводили на монокристалле Si(111).

II. Описание объекта и методов исследования

Подробное описание методики спектрометрии полного тока имеется в [27-33]. Спектры ПТ кристаллов кремния получены при облучении электронами с энергией 0–100 эВ, ток ~10^{-8} А (ток ионов Cs^+ и Cl^- ~10^{-6} А, энергия 3 кэВ). Чистоту поверхности контролировали по спектрам ВИМС. В качестве образцов использовали пластинки монокристаллов кремния *p*-типа (КДБ-7.5) с ориентацией грани (111). Рабочий вакуум при проведении исследований составлял 10^{-9} Торр.

III. Описание и анализ результатов

Перед началом работы по спектроскопии ПТ были параллельно сняты масс-спектры ВИ с поверхности грязного, не отожжённого, кремния методом ВИМС. Результаты исследований зонных структур кремния и оксида кремния методом спектроскопии ПТ показывают, что распределение плотности состояний в этих материалах похожи, в валентной зоне имеются (0–14 эВ) три максимума плотности заполненных состояний. Зона проводимости характеризуется двумя экстремумами в интервале энергии между уровнем Ферми и вакуума. По функции плотности состояний спектры ПТ кремния и оксида кремния не должны содержать интенсивной тонкой структуры. Однако, поверхность этих веществ характеризуется в большей степени ковалентной связью (51%), энергетическая структура приповерхностной области может существенно отличаться от объемной и подвергается сильной геометрической перестройке [34].

На рис. 1 приведены спектры ПТ в процессе адсорбции газов на поверхности кремния. Наблюдение газовой адсорбции по спектрам ПТ определяется характером перестройки структуры плотности состояний в приповерхностной области кремния. В случае физической адсорбции, когда энергия взаимодействия атомов невелика, можно ожидать, что электронная структура поверхности существенно не изменится. Интенсивность сигналов подложки ослабляется вследствие дополнительного рассеяния в адсорбционном слое. Адсорбция таких газовых молекул, как CO, CO_2 и H_2O не вносит особенностей в спектр ПТ кремния,

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

они только ослабляют его интенсивность [33]. В случае хемосорбции, когда энергия между атомами подложки и газов значительна и происходит электронный обмен между подложкой и адсорбированной частицей, можно ожидать появления дополнительных особенностей в спектрах, обусловленных возбуждением гибридизированных электронных состояний [28, 30].

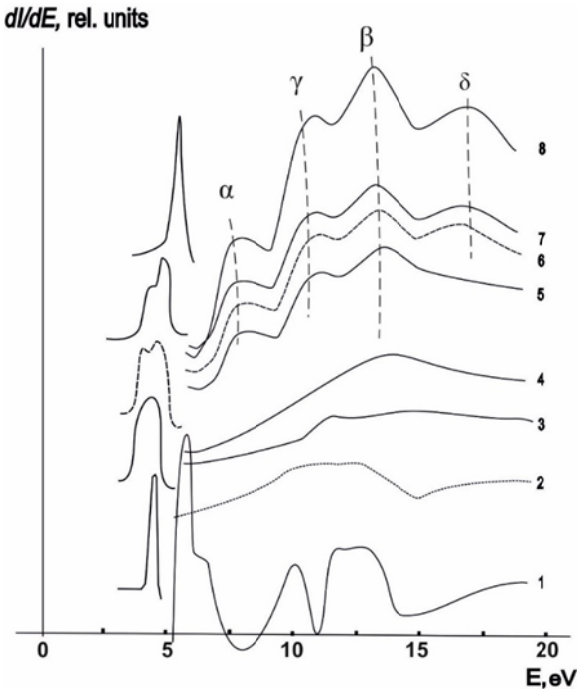


Рисунок 1. Изменение спектра ПТ Si(111) в процессе адсорбции газов и последующего отжига: *1* – чистый кремний со структурой 7×7, *2* – выдержка 10 мин в вакууме 10^{-9} Па, *3* – выдержка 20 мин в вакууме 10^{-9} Па, *4* – выдержка 2 часа в вакууме 10^{-9} Па, *5* – отжиг при температуре 200°С, *6* – отжиг при температуре 600°С, *7* – отжиг при температуре 700°С, *8* – отжиг при температуре 800°С

Одной из особенностей метода электронной спектроскопии ПТ является возможность параллельного контроля за величиной потенциала поверхности по положению первичного максимума в спектре [27, 35, 36]. Проведение таких измерений важно при исследовании адсорбционных процессов, тем более что при сравнительном анализе смещения первичного максимума и всего спектра можно выделить два компонента изменения работы выхода, один обусловлен изменением сродства, а другой изменением изгиба зон [30]. Так осуществляется дополнительный контроль за состоянием адсорбционного покрытия.

Проследим за изменением спектра ПТ и работы выхода образца Si(111) в процессе адсорбции газов при комнатной температуре. Кривая 1 на рис. 1, соответствующая спектру ПТ чистой поверхности Si(111) со структурой 7×7, приведена для сравнения.

Кривая 2 соответствует выдержке образца в течение 10 мин в вакууме при комнатной температуре, сопровождается уменьшением работы выхода примерно на 0.5 эВ и снижением интенсивности максимумов в спектре ПТ чистого кремния. При этом наблюдается только смещение первичного максимума, а весь спектр не изменяет своего положения относительно уровня Ферми (что говорит о неизменности изгиба зон). Следовательно, на первой стадии адсорбции изменение работы выхода происходит вследствие уменьшения электронного сродства. На этой стадии адсорбции (физическая адсорбция) прогрев образца (до 500°С) приводит к очистке поверхности кремния от адсорбированного слоя, величина потенциала поверхности и вид спектра ПТ возвращаются к первоначальным.

Дальнейшая выдержка образца в течение 20 мин при комнатной температуре (кривая 3) приводит к дальнейшему уменьшению работы выхода (на ~0.7 эВ), причем весь спектр смещается вместе с первичным максимумом, что свидетельствует об уменьшении поверхностного изгиба зон. Это, в свою очередь, указывает на уменьшение отрицательного заряда в поверхностных состояниях. Полученный результат находится в соответствии с представлениями о механизме хемосорбции кислорода, по которому кислород занимает свободные поверхностные валентности кремния, уменьшая плотность поверхностных электронных состояний.

Из этих кривых видно, что интенсивности пиков очень слабые, не резкие. Это происходит за счет рассеяния электронов в поликристаллической решетке адсорбированного слоя. Полуширина первичного пика равна примерно 1.2 эВ, наблюдается её уширение. Это говорит о степени неоднородности поверхности исследуемого образца. Первичный пик при энергиях электронов 3.5 эВ показывает начало отсчета кинетической энергии электронов и соответствует положению уровня вакуума на энергетической оси.

Отжиг при температуре 200°С не приводит к заметному изменению в спектре, только увеличивается интенсивность кривой, характерной спек-

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

тру ПТ SiO_x. После температурного отжига в течение 10 минут при температуре 600°C начинается удвоение первичного пика. Если на поверхности островковой пленки происходит раздвоение первичного пика, энергетическое положение одного соответствует работе выхода подложки, а другого работе выхода поверхности островка. Раздвоение первичного пика указывает на образование углеродных и оксидных соединений кремния.

Как видно, в спектре ПТ появляется максимум δ при энергии 17 эВ (что на 13 эВ больше посравнению с первичным пиком). сравнение с данными NEXAFS, TDOS [29] показывает, что этот максимум соответствует возбуждению 2p состояния атома углерода на незаполненные состояния выше уровня вакуума. По форме первичного пика можно сказать, что после отжига при температуре 700°C поверхность полностью покрывается сплошным окисным слоем. Проявление максимумов α, β, γ указывает на поверхностные электронные состояния, характерные для окисленного кремния.

Можно заметить, что при температуре отжига после 500°C начинается увеличение пика ионов углерода на поверхности. При сравнении спектров ПТ обнаружено, что при высоких температурах отжига кремния выше 500°C междоузельный углерод выходит из объема на поверхность кремния. Далее отжиг до температуры 1000°C не приводит к очистке поверхности от углерода и её соединений.

Дифракционная структура, присутствующая в спектрах ПТ, содержит определенную информацию о свойствах геометрической структуры поверхности. При исследовании монокристаллических образцов в энергетической зависимости интенсивности отраженного пучка проявляются дополнительные особенности в интервале энергий первичных электронов, соответствующие условиям появления дифракционных пучков. Эти особенности наблюдаются при энергиях, несколько меньших порога появления дифракционного пучка, в виде чередующихся экстремумов. Согласно существующим представлениям [37], тонкая структура обусловлена многократным рассеянием дифракционного пучка на поверхностном потенциальном барьере, что при определенных соотношениях между параметрами барьера и импульса электрона приводит к резонансному изменению интенсивности отраженного и проходящего пучков. Это явление известно под названием поверхностного резонанса, или резонанса на поверхностных состояниях [29], поскольку в динамической теории дифракции особенности поверхностного рассеяния связываются с квазистационарными поверхностными состояниями, расположенными выше уровня вакуума. Образцы с нарушенной поверхностью не дают дифракционной картины (например, после ионной бомбардировки, адсорбции газов, или в поликристаллических образцах), следовательно, дифракционный компонент в спектре будет отсутствовать. Также это относится к измерениям температурной зависимости спектров ПТ. Известно, что интенсивность дифракционных пучков уменьшается с ростом температуры образца. Поскольку волнообразная особенность связана с многократным рассеянием дифракционного пучка на поверхностном потенциальном барьере, то уменьшение его интенсивности с ростом температуры должно приводить к уменьшению интенсивности дифракционной особенности в спектре ПТ. Используя один из рассмотренных критериев, можно уверенно выделить из спектра ПТ особенности дифракционной природы. Перспективность дифракционных эффектов в спектрах ПТ дает возможность получать не только качественную, но и количественную информацию о структуре поверхности и динамике поверхностных частиц. Как видно, при последовательной выдержке и отжиге кристаллов кремния наблюдается окисление поверхности кремния. Отжиг приводит к усилению наблюдаемых эффектов. Даже отжиг до температуры 1000°C не приводит к очистке поверхности от кислорода, углерода и его соединений. Проведенные исследования при разных условиях показали, что структура поверхностного состояния зависит не только от температуры, но и от времени и вакуумных условий.

IV. Заключение

Проведение сравнительных измерений спектров ПТ на монокристаллической поверхности кремния и на той же поверхности, но с нарушенной геометрической структурой, показывает, что образцы с нарушенной поверхностью не дают дифракционной картины, и, следовательно, дифракционная компонента в спектре будет отсутствовать. Также это относится к измерениям температурной зависимости спектров ПТ. Известно, что интенсивность дифракционных пучков

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

уменьшается с ростом температуры образца. Поскольку волнообразная особенность связана с многократным рассеянием дифракционного пучка на поверхностном потенциальном барьере, то уменьшение ее интенсивности с ростом температуры должно приводить к уменьшению интенсивности дифракционной особенности в спектре ПТ. Используя один из рассмотренных критериев, можно уверенно выделить из спектра ПТ особенности дифракционной природы. Перспективность дифракционных эффектов в спектрах ПТ дает возможность получать не только качественную, но и количественную информацию о структуре поверхности и динамике поверхностных частиц.

Таким образом, в использовании температурного отжига для очистки поверхности кремния от загрязнений, есть свои плюсы и минусы. Нельзя допустить длительный отжиг при высоких температурах, который приводит к окислению кремния. А использование кратковременной вспышки можно использовать только для удаления физически (не химически) адсорбированного слоя атомов.

Метаданные

Total current spectroscopy of silicon oxide

U.B. Sharopov[1,2]

[1]Physical-Technical Institute NGO "Physics-Sun", Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Chingiz Aitmatov st., 2, 100084, Tashkent, Uzbekistan
[2]Institute of Materials Science, Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Chingiz Aitmatov st., 2, 100084, Tashkent, Uzbekistan

In this work, we consider the experimental data on the oxidation of the silicon surface in vacuum with subsequent annealing obtained by total current spectroscopy. Studies have shown that when using temperature annealing to clean the silicon surface from contamination, there are pluses and minuses. Prolonged annealing at high temperatures, which leads to silicon oxidation, must not be allowed. And the use of a short time flash can only be used to remove a physically (not chemically) adsorbed layer of atoms.

Keywords: total current spectroscopy, silicon, annealing, surface

Литература (References)

[1] A. Komilov. Gallium content-dependent efficiency limits of CIGS solar cells at AM1.5G solar irradiance. J. Photonics Energy **11** (2021). https://doi.org/10.1117/1.JPE.11.035501.

[2] A. Kuddus, R. Islam, S. Tabassum, A.B. Abu. Synthesis of Si NPs from River Sand Using the Mechanochemical Process and its Applications in Metal Oxide Heterojunction Solar Cells. Silicon **12**, 1723-1733 (2020). https://doi.org/10.1007/s12633-019-00267-6.

[3] N.N. Gerasimenko, Y.N. Parhomenko, V.Y. Troitskiy, A.V. Irzhak, M.N. Pavluchenko, K.K. Djamanbalin, A.S. Belogorohov. Quantum-dimensional structures produced by ion implantation. Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms. **206** 644-647 (2003). https://doi.org/10.1016/S0168-583X(03)00810-3.

[4] A.G. Komilov. Influence of CdS buffer layer thickness on the photovoltaic parameters of solar cells. Appl. Sol. Energy. **54**, 308-309 (2018). https://doi.org/10.3103/S0003701X18050092.

[5] A. Kaity, S. Singh, P.N. Kondekar. Silicon-On-nothing electrostatically doped junctionless tunnel field effect transistor (SON-ED-JLTFET): A short channel effect resilient design. Silicon **13**, 9-23 (2021). https://doi.org/10.1007/s12633-020-00404-6.

[6] C. Li, Z. He, Q. Wang, J. Liu, S. Li, X. Chen, W. Ma, Y. Chang. Performance improvement of PEDOT: PSS/N-Si heterojunction solar cells by alkaline etching. Silicon, (2021). https://doi.org/10.1007/s12633-021-01034-2Li

[7] N. Laxmi, S. Routray, K.P. Pradhan. III-Nitride/Si tandem solar cell for high spectral response: Key attributes of auto-tunneling mechanisms Silicon **12**, 2455-2463 (2020). https://doi.org/10.1007/s12633-019-00342-y.

[8] M.S. Choi, H.G. Na, A. Mirzaei, J.H. Bang, W. Oum, S. Han, S.-W. Choi, M. Kim, C. Jin, S.S. Kim, H.W. Kim. Room-temperature NO_2 sensor based on electrochemically etched porous silicon. J. Alloys Compd. **811**, 151975 (2019). https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.151975.

[9] M.K. Karimov, U.O. Kutliev, S.K. Ismailov, O.M. Uchkun o'g'li. Low energy Ar+Ion scattering on InGaP(001) surface. Journal Surf. Sci. Nanotechnol. E **18**, 164-167 (2020). https://doi.org/10.1380/EJSSNT.2020.164.

[10] M.K. Karimov, U.O. Kutliev, S.B. Bobojonova. Investigation of angular spectrum of scattered inert gas ions from the InGaP (001) surface. Phys. Chem. Solid State **22**, 742-745 (2021). https://doi.org/10.15330/pcss.22.4.

[11] M.K. Karimov, U.O. Kutliev, K.U. Otabaeva, M.U. Otabaev. Angular distributions of scattered Ne and Ar ions at the grazing incidence on the InGaP (001) 110 Surface, J. Nano-Electron. Phys. **12,** 05032-1-05032–4 (2020). https://doi.org/10.21272/jnep.12(5).05032.

[12] U. Khalilov, A. Bogaerts, E.C. Neyts. Toward the understanding of selective Si nano-oxidation by atomic scale simulations/ Acc. Chem. Res. **50**, 796-804 (2017). https://doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00564.

[13] L. Zong, B. Zhu, Z. Lu, Y. Tan, Y. Jin, N. Liu, Y. Hu, S. Gu, J. Zhu, Y. Cui. Nanopurification of silicon from 84% to 99.999% purity with a simple and scalable process. Proc. Natl. Acad. Sci. (USA) **112**, 13473-13477 (2015). https://doi.org/10.1073/pnas.1513012112.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

[14] A. Komilov. Study of the possibility of use of α-Si:H solar elements in photovoltaic thermal converters, Appl. Sol. Energy. **51**, 140-143 (2015). https://doi.org/10.3103/S0003701X15020048.
[15] D. Akinwande, C. Huyghebaert, C.-H. Wang, M.I. Serna, S. Goossens, L.-J. Li, H.-S.P. Wong, F.H.L. Koppens. Graphene and two-dimensional materials for silicon technology. Nature **573**, 507-518 (2019). https://doi.org/10.1038/s41586-019-1573-9.
[16] F. Shimura. Single-crystal silicon: growth and properties. In: Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials (Springer International Publishing, Cham, 2017). https://doi.org/10.1007/978-3-319-48933-9_13.
[17] Y. Gao, Y. Qin, C. Dong, G. Li. From crater eruption to surface purification of raw silicon: A treatment by pulsed electron beam, Appl. Surf. Sci. **311**, 413-421 (2014). https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.05.076.
[18] C. Papadopoulos. Silicon planar processing and photolithography, 7-14 (2016). https://doi.org/10.1007/978-3-319-31742-7_2.
[19] S.R. Morrison. Adsorption and desorption. In: The Chemical Physics of Surfaces. (Springer US, Boston, MA, pp 251-295, 1990). https://doi.org/10.1007/978-1-4899-2498-8_7.
[20] B. Vincent, S.U. Aswathy, T.D. Subash, T.D. Subha. A novel approach to white light radiation from silicon btsed Tunnel junction LEDs. Silicon (2020). https://doi.org/10.1007/s12633-020-00599.
[21] U.O. Kutliev, M.K. Karimov, F.O. Kuryozov, K.U. Otabaeva. Analysis of InGaP(001) surface by the low energy ion scattering spectroscopy. J. Phys. Conf. Ser. **1889**, 022063 (2021). https://doi.org/10.1088/1742-6596/1889/2/022063.
[22] U.O. Kutliev, M.K. Karimov, M.U. Otaboev. Orientation effects during scattering of Ar^+ ions from the InP(001) surface under grazing-angle ion bombardment. Inorg. Mater. Appl. Res. **11**, 503-506 (2020). https://doi.org/10.1134/S2075113320030272.
[23] R.W. Roberts. Generation of clean surfaces in high vacuum. Br. J. Appl. Phys. **14**, 537-543 (1963). https://doi.org/10.1088/0508-3443/14/9/301
[24] J. Verhoeven. Techniques to obtain atomically clean surfaces. In: Surface Contamination (Springer, US, Boston, MA, 499-512 (1979). https://doi.org/10.1007/978-1-4684-3506-1_33.
[25] F. Xi, H. Cui, Z. Zhang, Z. Yang, S. Li, W. Ma, K. Wei, Z. Chen, Y. Lei, J. Wu., Novel and efficient purification of silicon through ultrasonic-Cu catalyzed chemical leaching, Ultrason. Sonochem. **56**, 474-480 (2019). https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2019.04.040.
[26] J. Xu, S. Li, W. Zhang, S. Yan, C. Liu, X. Yuan, X. Ye, H. Li. The impact of deposition and annealing temperature on the growth properties and surface passivation of silicon dioxide films obtained by atomic layer deposition. Appl. Surf. Sci. **544** (2021) 148889. https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.148889.
[27] U.B. Sharopov, B.G. Atabaev, R. Djabbarganov. Defect formation on the surface of ZnO using low-energy electrons. J. Surf. Investig. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. **14**, 101-104 (2020). https://doi.org/10.1134/S1027451020010164
[28] U. Sharopov, B. Atabaev, R. Djabbarganov, M. Qurbanov. Mechanism of aggregation colloid centers on surface ionic crystals. In: Adv. Colloid Sci. IntechOpen (2016). https://doi.org/10.5772/65517.
[29] S.A. Komolov. Total current spectroscopy of surfaces. Gordon and Breach Science, Philadelphia, 1992. https://books.google.co.uz/books/about/Total_Current_Spectroscopy_of_Surfaces.html?id=p9QQI962g4YC&redir_esc=y.
[30] U.B. Sharopov, K. Kaur, M.K. Kurbanov, D.S. Saidov, E.T. Juraev, M.M. Sharipov. Controlling the low-temperature ionic purification of a silicon surface by electron spectroscopy. Silicon (2021). https://doi.org/10.1007/s12633-021-01268-0.
[31] U.B. Sharopov, B.G. Atabaev, R. Djabberganov, M.K. Kurbanov. Kinetics of aggregations of F2, F3, X, and colloid centers in LiF/Si(111) films upon low-temperature annealing. J. Surf. Investig. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. **7**, 195-199. (2013). https://doi.org/10.1134/S1027451012120117.
[32] U.B. Sharopov, B.G. Atabaev, R. Djabbarganov, M.K. Kurbanov, M.M. Sharipov. Procedure for determining defects in sputtered clusters of ionic crystals. J. Surf. Investig. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. **10**, 245-249 (2016). https://doi.org/10.1134/S1027451016010328.
[33] R. Djabbarganov, B.G. Atabaev, Z.A. Isakhanov, U.B. Sharopov. Energy threshold of the atomic and cluster sputtering of some elements under bombardment with Cs, Rb, and Na ions. J. Surf. Investig. X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. **13,** 640–643 (2019). https://doi.org/10.1134/S1027451019040049.
[34] E.Y. Schwartz. Dielectric materials: Radiation processes and radiation resistance (Riga, 1989).
[35] U.B. Sharopov, K. Kaur, M.K. Kurbanov, D.S. Saidov, S.R. Nurmatov, M.M. Sharipov, B.E. Egamberdiev. Comparison of electron irradiation on the formation of surface defects in situ and post thin-film LiF/Si(111) deposition. Thin Solid Films. **735**, 138902 (2021). https://doi.org/10.1016/j.tsf.2021.138902.
[36] A.S. Komolov, E.F. Lazneva, N.B. Gerasimova, Y.A. Panina, V.S. Sobolev, A.V. Koroleva, S.A. Pshenichnyuk, N.L. Asfandiarov, A. Modelli, B. Handke, O.V. Borshchev, S.A. Ponomarenko. Conduction band electronic states of ultrathin layers of thiophene/phenylene co-oligomers on an oxidized silicon surface. J. Electron Spectros. Relat. Phenomena **235**, 40-45 (2019). https://doi.org/10.1016/j.elspec.2019.07.001.
[37] S.A. Pshenichnyuk, A. Modelli, N.L. Asfandiarov, E.F. Lazneva, A.S. Komolov. Electron stimulated ring opening in diphenylphthalide dicarboxylic acid: Its likely role in the unique properties of phthalide-based materials. J. Chem. Phys. **151**, 214309 (2019). https://doi.org/10.1063/1.5130152.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Оксидланган кремнийнинг тўлиқ ток спектроскопияси

У.Б. Шаропов[1,2]

[1]Физика-техника институти НПО "Физика-Қуёш", Ўзбекистон Республикаси Фанлар академияси, Чингиз Айтматов кўчаси, 2, 100084, Тошкент, Ўзбекистон
[2]Материал шунослик институти Ўзбекистон Республикаси Фанлар академияси, Чингиз Айтматов кўчаси, 2, 100084, Тошкент, Ўзбекистон

Ушбу ишда тўлиқ ток спектроскопия услуби асосида кремний сиртининг вакуумда оксидланиши бўйича экспериментал маълумотларни кўриб чиқилган. Тадқиқотлар шуни кўрсатдики, кремний сиртини ифлосланишдан тозалаш учун ҳароратдан фойдаланиш ўзининг афзаллик ва камчиликлар мавжуд. Кремнийнинг оксидланишига олиб келадиган юқори ҳароратларда узоқ муддат қиздиришга йўл қўймаслик керак. Қисқа муддатли қиздиришдан фақат атомларнинг физикавий (кимёвий эмас) адсорбсияланган қатламини олиб ташлаш учун фойдаланилиши мумкин.

Калит сўзлар: тўлиқ ток спектроскопияси, кремний, қиздириш, сирт.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Получение, морфология и фотоэлектрические свойства эпитаксиальных пленок $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ на основе GaAs

С.З. Зайнабидинов, А.Й. Бобоев*, Д.П. Абдурахимов

Андижанский государственный университет, Университетская 129, 170100, Андижан, Узбекистан

Получена 14.10.2021

* Corresponding author: e-mail aboboevscp@gmail.com, Phone: +998 90 122 20 50

Изучены структурные свойства тонкопленочных твердых растворов $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$, выращенных методом жидкофазной эпитаксии на подложках монокристаллов GaAs. Полученные эпитаксиальные слои имели толщину 10 мкм, *p*-тип проводимости, удельное сопротивление 0.17 Ом·см. Морфологические исследования с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ) показали, что наблюдаемые на поверхности эпитаксиальных слоев $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ наноконусы обусловлены присутствием в них атомов Ge. Спектры фоточуствительности этих твердых растворов имеют своеобразные флуктуации, обусловленные образованием в них различных комплексов заряженных ионов атомов составляющих компонентов. Анализ спектров фоточувствительности гетероструктур *n*-GaAs-*p*-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ с помощью программы Wolfram Mathematics 7 показал, что спектр состоит из трех пиков, обусловленных соединениями As-Ge, Ge-Ge и Ga-Ge.

Ключевые слова: жидкофазная эпитаксия, рентгенограмма, подложка, пленка, сфалерит, наноконус, фоточуствительность.

The structural properties of thin-film solid solutions $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ grown by liquid-phase epitaxy on GaAs single crystal substrates are studied. The resulting epitaxial layers had a thickness of 10 μm, a resistivity of 0.17 Ohm·cm, and *p*-type conductivity. Morphological studies using atomic force microscopy (AFM) showed that the nanocones observed on the surface of $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ epitaxial layers are due to the presence of Ge atoms in them. The photosensitivity spectra of these solid solutions have peculiar fluctuations due to the formation in them of various complexes of charged ions of atoms that make up the components. Analysis of the photosensitivity spectra of *n*-GaAs-*p*-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ heterostructures using the Wolfram Mathematics 7 software showed that its spectrum consists of three peaks due to As-Ge, Ge-Ge and Ga-Ge.

Keywords: liquid-phase epitaxy, X-ray diffraction pattern, substrate, film, sphalerite, nanocone, photosensitivity.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.288

I. Введение

Известно, что на поверхности тонких эпитаксиальных слоев, полученных методом жидкофазной эпитаксии, образуются различные наноразмерные объекты типа квантовых ям (КЯ), квантовых точек (КТ), нанообъединений примесных атомов и другие, обусловленные возникновением периодических упорядоченных структур в результате образования смачивающего слоя на поверхности и в объеме эпитаксиальных пленок полупроводниковых гетероструктур [1]. Основными факторами для формирования таких нанообъектов являются различия в величинах постоянных кристаллических решеток нанообразований и матрицы. Спонтанное упорядочение наноструктур

позволяет образовать включения узкозонных полупроводников в широкозонной матрице, и тем самым создавать локализующий потенциал для носителей тока. Периодические структуры таких включений могут создавать массивы КТ, КЯ и квантовых проволок или сверхрешеток. Авторы работы [2], исходя из энергии ковалентной связи атомов материалов нановключений и матрицы, предлагают разделить эти нанобъекты на «квантовые точки» и «квантовые ямы» следующим образом: когда ширина запрещенной зоны нановключений (E_g, A) больше, чем ширины запрещенной зоны базового полупроводника (E_g, B), (E_g, A)>(E_g, B), то образуется квантовая точка, и наоборот, когда (E_g, A)<(E_g, B), квантовая яма. Однако природа таких образований, их энергии взаимодействия, а также влияние их составляющих на структурные и фотоэлектрические свойства матрицы в зависимости от формата, состава и типа примесных атомов остаются не исследованными.

Отсюда следует, создание новых многослойных гетероструктур с нанообъектами, исследования морфологических структурных особенностей таких образований и механизмов примесного фотовольтаического эффекта и механизмов выброса-транспорта-разделения носителей заряда в структурах с КТ и КЯ являются весьма актуальными.

II. Образцы и методика эксперимента

Эпитаксиальные пленки были получены на GaAs подложке с удельным сопротивлением 250 Ом·см и толщиной 350 мкм *n*-типа проводимости методом жидкофазной эпитаксии из раствора-расплава (Sn-Ge-GaAs) в атмосфере очищенного палладием водорода. Начальная температура кристаллизации эпитаксиального слоя составляла 700^{o}C, скорость охлаждения раствора-расплава 1^{o}C/мин. Выращенные слои имели толщину 10 мкм, удельное сопротивление 0.17 Ом·см, *p*-тип проводимости.

Возбуждение фотолюминесценции (ФЛ) производили лазерным излучением ($\lambda_л$=325 нм) со стороны эпитаксиального слоя при температуре жидкого гелия 4.12 К, сигнал регистрировался на установке СДЛ-2. Спектральная зависимость фоточувствительности гетероструктур *n*-GaAs-*p*-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ была измерена оптическим спектрометром, оснащенным зеркальным монохроматором фирмы CARLZEISJENA с кварцевой оптикой, что давало возможность исследовать образцы в диапазоне энергии фотонов от 1 до 3 эВ.

Исследования поверхности проводили с использованием промышленного атомно-силового микроскопа (АСМ) Solver-NEXT, позволяющего измерять рельеф поверхности, распределение потенциала по поверхности.

III. Экспериментальные результаты

На рис. 1 показано трехмерное АСМ изображение эпитаксиальной пленки $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$.

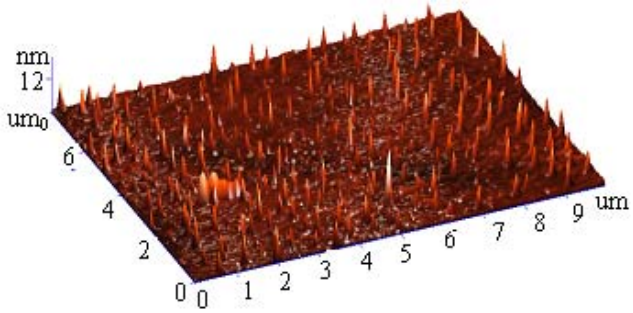


Рисунок 1. АСМ изображение эпитаксиального слоя твердого раствора $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$.

Видно, что на поверхности пленок образуются отдельные нанообъекты различного размера. В работе [3] показано, что физические свойства эпитаксиальных слоев сильно зависят от формы и плотности (телесного угла) наноконуса: если угол составляет около 1.047 rad., то наноконус представляет систему квантовых точек 0D; если угол стремится к 3.14 rad., тогда наноконус вырождается в квантовую яму 2D; если угол стремится к 0 rad., наноконус вырождается в систему проволок 1D. В нашем случае телесный угол наноконуса стремится к 3.14 rad., т.е. наноконус является квантовой ямой. Анализ показал, что диаметр основания наноконусов варьирует в интервале от 70 до 90 нм, а высота от 3 до 12 нм. При эпитаксиальном выращивании различных полупроводниковых материалов, энергия деформации, вызванная несоответствием параметров кристаллической решетки контактирующих материалов, является основным факторам для формирования самоорганизующихся трехмерных наноконусов [4]. Поскольку величины постоянных решеток для систем GaAs/Ge (0.323%) почти одинаковы, то возможно формирование наноконусов Ge на поверхности пленок GaAs.

В работе [5] нами было показано, что эпитаксиальные пленки $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x(ZnSe)_y$ выращен-

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

ные на GaAs подложке имели совершенную монокристаллическую структуру с ориентацией (100). В пленке присутствовали когерентно расположенные нанокристаллиты Ge с параметрами решетки a_{Ge} = 5.67 Å и размерами 44 нм по направлению (100). Заметим, что параметр решетки нанокристаллитов Ge в эпитаксиальной пленке на ~0.22% больше, чем его табличное значение, что, возможно, обусловлено деформацией кристаллической решетки эпитаксиальной пленки. Размеры наноконусов, полученные исследованиями АСМ на поверхности пленки и наноконусов, рентгеновской дифракцией в эпитаксиальной пленке, имели близкие значения. На основе этих данных, а также результатов структурных анализов исследованных пленок можно сделать вывод, что наблюдаемые наноконусы на поверхности эпитаксиальных слоев обусловлены нанокристаллитами Ge.

Для определения роли компонентов твердых растворов в наблюдаемых процессах нами исследованы спектры фотолюминесценции (ФЛ) при температуре 4.12 К и спектральные зависимости фоточувствительности изготовленных гетероструктур. На рис. 2 приведен спектр ФЛ поверхности эпитаксиального слоя $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$.

Как видно из рис. 2, спектр ФЛ твердого раствора $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ имеет широкую полосу, охватывающую практически весь инфракрасный диапазон спектра излучения с максимумом пика при λ_{max}=852 нм. Этот пик соответствует ширине запрещенной зоны GaAs, равной 1.45 эВ. В спектрах твердых растворов наблюдается ещё один пик с максимумом при 946 нм, который, возможно, связан с излучательным центром атомов германия в запрещенной зоне GaAs.

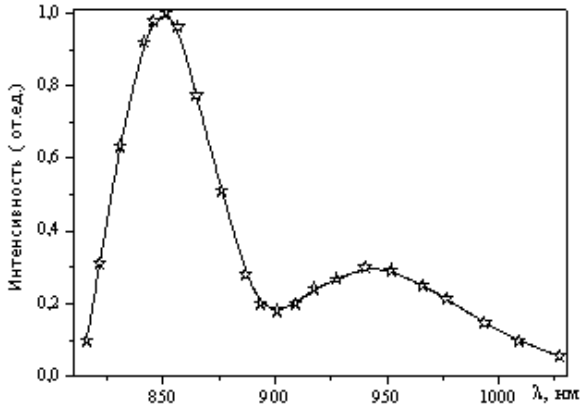


Рисунок 2. Фотолюминесценция *n*-GaAs-*p*-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ гетероструктур при гелиевой температуре.

На рис. 3 представлена спектральная зависимость фоточувствительности $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ гетероструктур, откуда видно, что фоточувствительность исследованных гетероструктур охватывает диапазон энергий фотонов от 1.13 до 1.73 эВ. Фоточувствительность исследованной структуры начинается при энергиях фотонов 1.13 эВ и максимум спектральный фоточувствительности наблюдается при 1.34 эВ (~ 924 нм), что меньше, чем 1.42 эВ (872 нм) запрещенной зоны GaAs. Здесь не резкий спад спектральной чувствительности, возможно, обусловлен толщиной слоя твердых растворов $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$, эффективно поглощающего низкоэнергетические кванты.

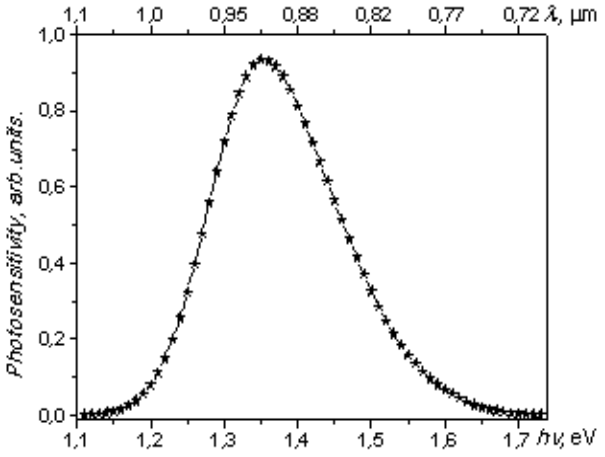


Рисунок 3. Спектральная фоточувствительность *n*-GaAs-*p*-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ гетероструктур [6].

С целью более глубокого изучения механизмов поглощения энергии фоточувствительность гетероструктуры оценивали по программе Wolfram Mathematics 7 в гауссовском приближении и результаты разложили на гауссовы линии. Исходные значения энергий E_i отдельных фотопиков задавались с учетом максимумов поглощения на экспериментальной кривой. В результате оказалось, что проанализированный спектр можно описать совокупностью трех гауссовых линий со значениями E_i, отвечающими оптимальному совпадению экспериментальной и суммарной аппроксимирующей гауссовых кривых. При этом разброс значений E_i фотопиков по сравнению с табличными не превышает 0.03 эВ. Все три фотопика, соответствующие гауссовым кривым, наблюдали в интервале энергий фотонов: $E_{ph,1}$ – (1.1÷1.61) эВ, $E_{ph,2}$ – (1.16÷1.65) эВ, $E_{ph,3}$ – (1.35÷1.7) эВ соответственно (рис. 4).

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

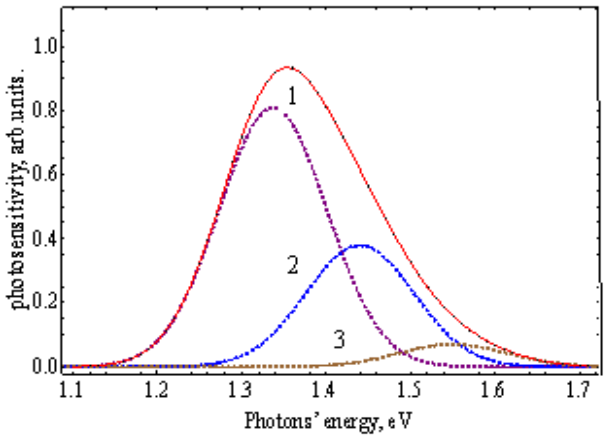


Рисунок. 4. Гауссово приближение спектральной фоточувствительности *n*-GaAs-*p*-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ гетероструктур. Сплошная кривая – сумма расчетного гауссова спектра; пунктирные кривые – гауссовы компоненты расчетного спектра [6].

На рис. 4 приведен спектр первого гауссовского компонента (кривая 1), который начинается с энергии фотонов 1.1 эВ и, возможно, обусловлен узкозонным компонентом атомов германия, размешенных в узлах галлия, образуя ковалентную связь с атомами арсенида, и образует мелкий энергетический уровень донорного характера [7]. Поскольку компоненты Ge_2 замещают атомы Ga и As в тетраэдрической решетке GaAs [8], связи Ga-As ослабляются под влиянием окружающих их атомов Ge. Поскольку энергия связи атомов Ge-Ge, когда они находятся в тетраэдрической решетке германия, определяется шириной запрещенной зоны Ge (E_{Ge}=0.67 эВ), и она меньше, чем ширина запрещенной зоны GaAs (E_{GaAs}=1.42 эВ), то энергия ионизация связи Ge-Ge увеличивается, когда она находится в окружении GaAs. Кроме того, спектр этого компонента резко возрастает, начиная с энергии фотонов 1.2 эВ, что свидетельствует об образовании комплексов между рекомбинационными центрами, которые, как сказано выше, являются атомами с мелкими донорными уровнями, собственный атом нанокристаллов германия в слое GaAs имеют акцепторную природу [9]. Это означает, что парные атомы Ge_2 частично замещают некоторые молекулы арсенида галлия в дефектоспособных областях арсенид-галлиевой решетки и в этих местах самообразуются нанокристаллиты [10]. Поэтому максимум первого гауссовского компонента наблюдается при энергии фотонов 1.34 эВ, который обусловлен шириной запрещенной зоны твердого раствора $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ [11].

Анализ на основе представлении авторов [10] показывает, что в арсенид-галлиевых монокристаллах нанокристаллы Ge имеют собственный энергетический уровень с акцепторным характером.

Максимум второго гауссовского компонента (рис. 4, кривая 2) наблюдается при 1.44 эВ, и этот пик также соответствует рекомбинации зарядов из зоны проводимости на акцепторные состояния в *p*-GaAs, что подтверждают результаты фотолюминесценции кристаллов *p*-GaAs при энергии фотонов 1.35–1.65 эВ [11].

Максимум третьего гауссовского компонента (рис. 4, кривая 3) наблюдается при 1.55 эВ, что, возможно, обусловлено изовалентными нанокристаллитами Ge в слое GaAs. В работе [11] показано, что спектр внешней квантовой чувствительности фотоэлемента на основе гетероструктуры *p*-GaAs/*p*-Ge/*n*-Ge охватывает диапазон излучений от 600 до 1800 мкм. В наших экспериментах также наблюдался такой фотоотклик, который накладывается на область спектра энергии от 1.25 до 1.72 эВ.

В целях объяснения экспериментальных данных и гауссовских приближениий по спектральной зависимости фоточувствительности гетероструктуры *p*-(GaAs)-*n*-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ нами была исследована роль отдельных компонентов исследуемого твердого раствора в этих процессах.

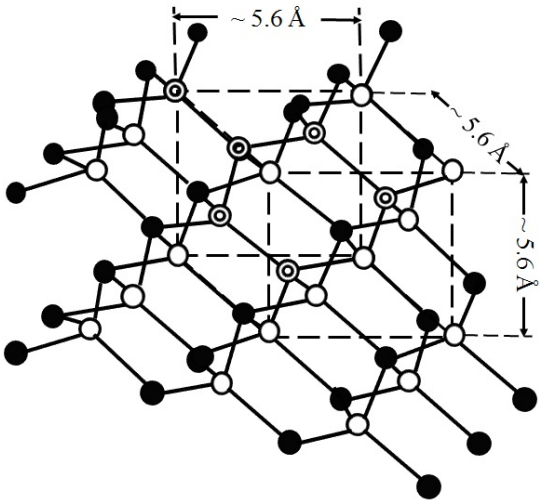


Рисунок 5. Пространственная конфигурация тетраэдрических связей молекул непрерывных твердых растворов $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$: o – As, ● – Ga, – Ge [6].

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

На рис. 5 представлена пространственная конфигурация тетраэдрических связей в пределах нанокластеров, образуемых примесями Ge и GaAs в кристаллах GaAs. Как видно, нанокластеры в твердом растворе $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ охватывают три As-Ge, одну Ge-Ge и три Ga-Ge связей, 8 атомов Ga, Ge и As. Так как элементарная ячейка материалов с алмазоподобной структурой состоит из 8 атомов, линейный размер нанокластера 5.6, 5.6, 5.6 Å почти равняется параметру решетки GaAs. Это позволяет предположить, что базовая решетка исследуемого твердого раствора состоит из двойного GaAs и Ge, то есть $GaAs_{1-x}Ge_x$. Кроме того, поскольку атомы Ge в решетке GaAs распределены равномерно, а другие атомы распределены неравномерно, в дефектоспособных областях решетки матрицы эти атомы примеси самообразуются в нанокристаллы Ge.

IV. Заключение

Таким образом, выращенные методом жидкофазной эпитаксии пленки $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ являются монокристаллическими, с кристаллографической ориентацией (100). Наличие атомов Ge в тетраэдирической решетке GaAs приводит к тому, что в его спектре фоточувствительности наблюдается пик, который принадлежит нанокристаллам Ge, объединенным с молекулами GaAs. Морфологические исследования показали, что наблюдаемые наноконусы на поверхности эпитаксиальных слоев $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ обусловлены примесными атомами Ge; результаты анализа спектров фоточувствительности n-GaAs-p-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ гетероструктур с помощью программы Wolfram Mathematics 7 показали, что в спектре общей гауссовской линии имеется крайняя длинноволновая область с энергией фотонов 1.1 эВ и три компонента, которые соответствуют соединениям As-Ge, Ge-Ge и Ga-Ge, и подтверждают образование соответствующих энергетических уровней, связанных с такими соединениями в запрещенной и валентной зонах арсенида галлия.

Благодарности. Авторы благодарны д.ф.-м.н. проф. А.С. Саидову за обсуждение результатов по спектральной фоточувствительности гетероструктур.

Работа выполнена по гранту № Ф2-68 Комитета по координации и развития науки и технологий при Кабинете Министров Республики Узбекистан.

Метаданные

Receipt, morphology, and photoelectrical properties of epitaxial films of $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ on GaAs substrates

S.Z. Zaynabidinov, A.Yu. Boboev, D.P. Abdurakhimov

Andijan State University, University Street 129, 170100, Andijan city, Uzbekistan

The structural properties of thin-film solid solutions $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ grown by liquid-phase epitaxy on GaAs single crystal substrates are studied. The resulting epitaxial layers had a thickness of 10 μm, a resistivity of 0.17 Ohm·cm, and p-type conductivity. Morphological studies using atomic force microscopy (AFM) showed that the nanocones observed on the surface of $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ epitaxial layers are due to the presence of Ge atoms in them. The photosensitivity spectra of these solid solutions have peculiar fluctuations due to the formation in them of various complexes of charged ions of atoms that make up the components. Analysis of the photosensitivity spectra of n-GaAs-p-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ heterostructures using the Wolfram Mathematics 7 software showed that its spectrum consists of three peaks due to As-Ge, Ge-Ge and Ga-Ge.

Keywords: liquid-phase epitaxy, X-ray diffraction pattern, substrate, film, sphalerite, nanocone, photosensitivity.

Литература (References)

[1] K.D. Moiseev, Ja.A. Parkhomenko, E.V. Gushina, A.V. Ankudinov, M.P. Mikhaylova, N.A. Bert, Ju.P. Jakovlev. Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov **43**, No.8, 1142 (2009).
[2] A.S. Saidov, Sh.N. Usmonov, K.A. Amonov, M.S. Saidov, B.R. Kutlimuratov. Appl. Sol. Energy **53**, No.4, 287 (2017).
[3] S.Z. Zaynabidinov et al. Semiconductors **50**, No.1, 59 (2016).
[4] Artur Medvid, Pavel Onufriev, Renata Jarimaviciute-Gudaitiene, Edvins Dauksta and Igoris Prosycevas. Nanoscale Research Letters No.8, 264 (2013).
[5] S.Z. Zaynabidinov et al. Semiconductors **50**, No.1, 59 (2016).
[6] A.Y. Boboev et al. Nauchny vestnik NamGU No.1, 58 (2020).
[7] S.S. Khludkov. Vestnik Tomskogo Gosudarstvenogo Universiteta No.285, 84 (2005).
[8] M.S. Saidov. Applied Solar Energy **43**, No.1, 45 (2007).
[9] K.S. Zhuravlev, S.I. Chikichev, R. Shtaske, N.A. Jakusheva, Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov **24**, No.9, 1645 (1990.
[10] V.Ya. Aleshkin, A.A. Dubinov, K.E. Kudryavtsev, V.V. Rumyantsev, A.A. Tonkikh, N.D. Zakharov, and B.N. Zvonkov. Journal of Applied Physics **115**, No.4, 43512 (2014).

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

[11] V.P. Khvostikov, L.S. Lunin, V.I. Ratushnyi, E.V. Oliva, M.E. Shvartc, O.A. Khvostikova. Pis'ma v ZhTF **29**, No.14, 46 (2003).

GaAs асосидаги $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ эпитаксиал пленкаларнинг олиниши, морфологияси ва фотоэлектрик хоссалари

С.З. Зайнабидинов, А.Й. Бобоев, Д.П. Абдурахимов

Андижон давлат университети, Университет кўчаси 129, 170100, Андижан, Ўзбекистон

GaAs монокристалл тагликларига суюқ фазали эпитакасия усули билан ўстирилган юпқа пардали $(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ қаттиқ қоришмаларининг тузилмавий хосалари ўрганилди. Олинган эпитаксиал қатламлар қалинлиги 10 мкм ни ташкил этиб, 0.17 Ом·см солиштирма қаршиликка ҳамда *p*-тур ўтказувчанликка эга. Атом кучи микроскопи ёрдамида ўтказилган морфологик тадқиқотлар $GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ эпитаксиал қатлам сиртида Ge атомлари йиғилиб наноконусларни шаклланти-риши аниқланди. Бундай қаттиқ қоришмаларнинг спектрал фотосезгирлиги, уларда таркибий қисмларни ташкил этувчи атомларнинг зарядланган ионларининг турли комплекслари пайдо бўлиши туфайли ўзига хос флуктацияга эга. *n*-GaAs-*p*-$(GaAs)_{1-x}(Ge_2)_x$ гетеротузилмасининг спектрал фотосезгирлиги Wolfram Mathematics 7 дастури ёрдамида таҳлил қилинганида, унинг спектри As-Ge, Ge-Ge ва Ga-Ge бирикмалари туфайли учта чўққидан иборат эканлиги кўрсатилди.

Калит сўзлар: тагликларига суюқ фазали эпитаксия, рентгенограмма, таглик, пленка, сфалерит, наноконус, фотосезгирлик.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Influence of accelerated electrons on the structure, crystallite size and surface of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ crystal with x = 0.01

M.Yu. Tashметov [1], F.K. Khallokov[*,1], N.B. Ismatov[1], S.Kh. Umarov[2]

[1]Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Mirzo Ulugbek district, Ulugbek township, Khorasan 1, 100214, Tashkent, Uzbekistan
[2]Bukhara State Medical Institute, 1 Navai Avenue, Bukhara, Uzbekistan

Received 28.12.2021

* Corresponding author: e-mail f_k_xalloqov@rambler.ru, Phone: +998 91 411 92 63

В работе исследовано влияние электронного облучения на структуру и морфологию поверхности монокристалла и поликристалла $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x=0.01). Облучение монокристалла $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ электронами с энергией 2 МэВ и флюенсом 2×10^{17} электрон/см^2 приводит к увеличению максимального значения среднего арифметического отклонения профиля от R_a=5.4 нм до R_a=25.2 нм, а также приводит к увеличению высоты средней шероховатости от R_z=72.0 нм до R_z=152.9 нм. Облучение порошкового $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ электронами флюенсом 2×10^{17} электрон/см^2 способствует увеличению размера кристаллитов от 36.87 nm до 41.76 nm, что, скорее всего, связано с уменьшением границ раздела.

Ключевые слова: монокристалл, структура кристаллов, элементарная ячейка, пространственная группа, электронное облучение, флюенс, размер кристаллитов, шероховатость.

In this work, we studied the effect of electron irradiation on the structure and morphology of the surface of a single crystal and polycrystal $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x=0.01). Irradiation of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal with electrons with an energy of 2 MeV and a fluence of 2×10^{17} electron/cm^2 leads to an increase in the maximum value of the mean arithmetic deviation of the profile from R_a=5.4 nm to R_a=25.2 nm, and also leads to an increase in the height of the average roughness from R_z=72.0 nm to R_z=152.9 nm. Irradiation of powder $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ with electrons with a fluence of 2×10^{17} electron/cm^2 promotes an increase in the crystallite size from 36.87 nm to 41.76 nm, which is most likely associated with a decrease in size of the interface.

Keywords: single crystal, crystal structure, unit cell, space group, electron irradiation, fluence, crystallite size, roughness.)

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.289

I. Introduction

At present, there is an increasing interest in the study of new semiconductor materials containing several elements, which makes it possible to control their properties by varying the content of elements. $TlInS_2$ single crystals are one of such multicomponent complex wide-band semiconductors of the $A^{III}B^{III}C^{VI}_2$ type, in which it is possible to replace part of the sulfur atoms, as well as part of the indium atoms. Changing the composition allows one to widely vary the electro-physical, photoelectrical, optical, and other properties. Wide-band semiconductors $TlInS_2$ are promising for the manufacture of photoelectric converters, spectrum analyzers, and radiation detectors [1].

The study of $TlInS_2$ is of interest, since many of their properties depend on the crystal structure, stability to external influences, defects, etc. Therefore, the

crystal structure and properties of the $TlInS_2$ crystal were studied in [1-2]. Among them, $TlInS_2$ [3] is the most promising semiconductor, which allows one to "select" the optimal properties by replacing some of the sulfur atoms with other atoms in a wide concentration range [3]. According to [4-9], $TlInS_2$ compounds have different crystal structures (monoclinic, hexagonal, tetragonal triclinic and orthorhombic). The effect of the substitution of a part of sulfur atoms by selenium atoms on the structure, phase state, optical characteristics, and Raman spectroscopy was studied in detail in [10-11].

The main parameters of semiconductors depend not only on the structure, but also on the defects present in them and their type. In many cases, to improve certain properties, defects are specially introduced by various methods. One of the ways to create (or anneal) defects is to irradiate the sample with gamma-rays, neutrons, protons, and electrons. The effect of gamma-rays on the structure of $TlInS_2$ has been studied in a few works, for example, in [12], where a phase transition from the initial monoclinic phase to the hexagonal phase in a thin surface layer was established at high doses of irradiation (1000–1500 Mrad) with gamma-rays. The influence of electrons on structures and structural parameters is not studied, although it is of interest, since the types of formed radiation defects in these cases can be different [3].

In [13-15], the interaction of $TlInS_2$ with $TlErS_2$ was studied, and was found that at a component ratio of 1:1, a compound Tl_2InErS_4 with congruent melting is formed, as well as solid solutions based on $TlInS_2$.

The $TIInS_2$-$TIYbS_2$ system was studied in [16]. The authors claim that the solubility of $TIYbS_2$ in $TIlnS_2$ at room temperature is 12 mol.%, and the $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ solid solutions have a tetragonal structure.

It should be noted that the structure of the ternary compound $TlCrS_2$ was studied in [17] and was found that $TlCrS_2$ has hexagonal symmetry with unit cell parameters a=3.538 Å and c=21.92 Å [18]. It should be noted that the substitution of a part of indium atoms in $TlInS_2$ with atoms of another group, chromium, is also of interest, since it can introduce a "change" in the initial crystal structure and its parameters, as well as on the surface, since the thermal characteristics of indium and chromium differ [18-19].

However, in the literature, there is almost no study of the $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) compound and the effect of radiation on its structures and surfaces, which is most likely due to the difficulty of synthesizing samples.

Therefore, the purpose of this work is to study the structure, surface morphology and the effect of accelerated electrons on the structure and surface of the $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ crystal (x = 0.01).

II. Experimental procedure

An assessment of the possibility of chromium solubility in the bulk of the crystal lattice of $TlInS_2$ indicates that the ionic radius of the dopant Cr^{3+} (0.65 Å) is closer to the ionic radius of In^{3+} (0.94 Å) than to the ionic radius of Tl^{1+} (1.49 Å), i.e. In a layered $TlInS_2$ crystal, partial replacement of indium with chromium corresponds to the condition for the formation of a substitutional solid solution. Highly pure chemical elements Tl (0%), In (0%), S, Sulfur elemental extra pure model (EP-16-5), and Cr (99.99%) were used as initial components. $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) was synthesized by direct fusion of chemical elements taken in stoichiometric ratios in a quartz ampoule with a vacuum of up to 10^{-5} Pa.

Electron irradiation of $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) was carried out at the «Electronika U-003» accelerator of the INP AN RUz. A three-dimensional image of the surface relief of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ sample (x = 0.01) was obtained with an SPM 9700 HT scanning probe microscope (Shimadzu). The study was carried out in a contact mode of operation of a scanning probe microscope. For this, a sample area of 30×30 μm was selected and the number of "peaks-protrusions", their half-width and height, before and after irradiation with accelerated electrons, were determined.

X-ray structural studies of $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) were carried out on an Empyrean diffractometer with CuK_α radiation in the angle range $2\theta_B$=(7–90)° at a scanning speed of 0.36 degrees/min. A full-profile analysis of the results obtained was carried out using the Rietveld method [20], and the center of the peak was determined using the OriginPro9 program [21].

To study the effect of accelerated electrons on the structure of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal (x = 0.01), it was irradiated with electrons with an energy of 2 MeV and a beam current density of 0.375 mkA/cm^2 [22]. The energy of the irradiated electrons was selected based on the density and thickness of the samples under study. Sample $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) was installed perpendicular to the direction of the electron beam at a distance of 0.4 m from the electron accele-

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

rator sweep, and irradiation was performed to an electron fluence of 2×10^{17} el./cm^2.

To obtain more complete structural information on the effect of electron irradiation on the structure we also studied the initial and irradiated powdered $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ ($x = 0.01$).

III. Experimental results and discussion

The study of the effect of radiation on the surface roughness of $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ ($x = 0.01$) showed that it grows under the action of accelerated electrons. However, the width and height of the tubercle increases (Fig. 1, 2, 3).

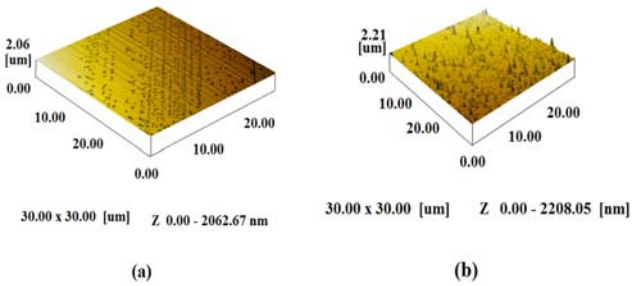


Figure 1. Topography of the surface of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal with $x = 0.01$: *a* – initial sample; *b* – irradiated with a dose of 2×10^{17} electron/cm^2.

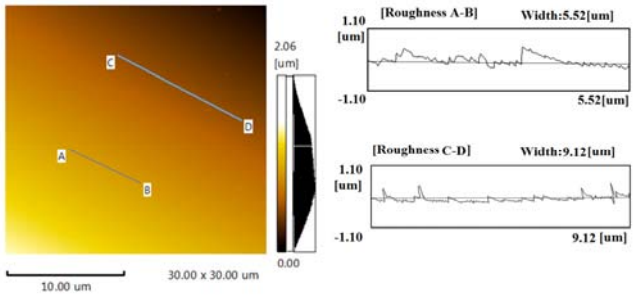


Figure 2. Roughness of the surface of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal with $x = 0.01$.

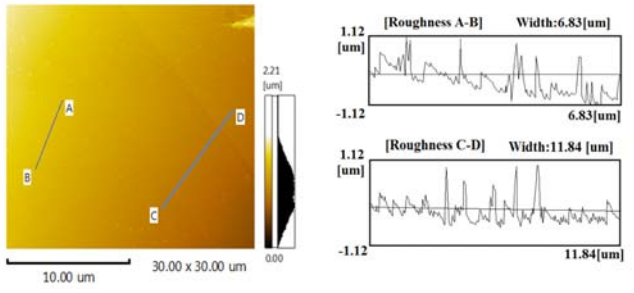


Figure 3. Roughness of the surface of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal with $x = 0.01$ after electron irradiation with a fluence of 2×10^{17} electron/cm^2 .

The measurement showed that the maximum value of the arithmetic mean deviation of the profile of the initial $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ crystal ($x = 0.01$) is R_a = 5.4 nm, the height of the mean roughness R_z = 72.0 nm, and after irradiation with electrons with a fluence of 2×10^{17} electron/cm^2 the maximum value of the mean arithmetic deviation of the profile is R_a = 25.2 nm and the average roughness height R_z = 152.9 nm.

The processing of the X-ray diffraction pattern (Fig. 4) showed that the initial single crystal $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ ($x = 0.01$) has a hexagonal (space group P63/mmc) structure. In this case, the unit cell parameters are a = 3.958 Å, b = 3.958 Å, c = 14.922 Å, and the atomic coordinates and thermal factors are given in Table 1.

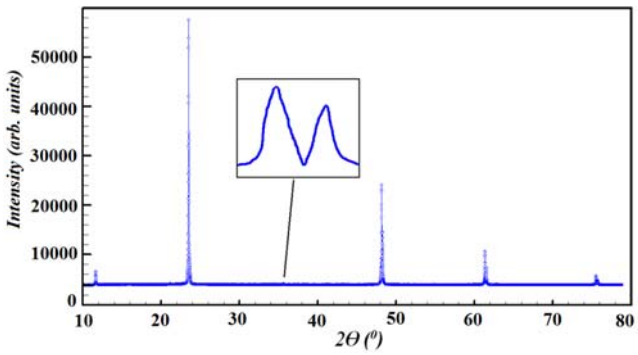


Figure 4. X-ray diffraction pattern of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal ($x = 0.01$).

Table 1. The positions and coordinates of the atoms of the $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal ($x = 0.01$) in the space group. $P6_3/mmc$.

№	Atom	Atomic coordinates			Heat factor
		x	*y*	*z*	*B*
1	Tl	0.3333	0.6667	0.2500	0.669
2	In	0.0000	0.0000	0.0000	0.878
3	S	0.3333	0.6666	0.9037	0.913
4	Cr	0.0000	0.0000	0.0000	0.132

After irradiation with 2 MeV electrons and a fluence of 2×10^{17} electron/cm^2, the unit cell parameters of the $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal ($x = 0.01$) are a = 3.852 Å, b = 3.852 Å, c = 14.911 Å and α = 90°, β = 90°, γ = 120°. The results obtained indicate that the unit cell volume of the $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal slightly decreased after irradiation with electrons; the introduced amount of Cr ($x = 0.01$) weakly affects the parameters of the crystal lattice of the $TlInS_2$ matrix. The obtained crystallographic data for the single crystal $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ ($x = 0.01$) agree with the $TlInS_2$ data

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

(a = 10.90 Å, b = 10.94 Å, c = 15.18 Å, β = 100.21°) [6].

The X-ray diffraction pattern of the initial $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ powder sample (x = 0.01) was processed on the assumption of the formation of a hexagonal (space group $P6_3/mmc$) structure; however, the Bragg value R_B is 2.15 factor, indicating that the proposed model was consistent with the experimental results (R_B is 1.59). Calculations of the X-ray diffraction pattern assuming the formation of a monoclinic unit cell, as in $TlnS_2$, showed the formation of the same phase in powder $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$, i.e. with space group C2/c (Fig. 5).

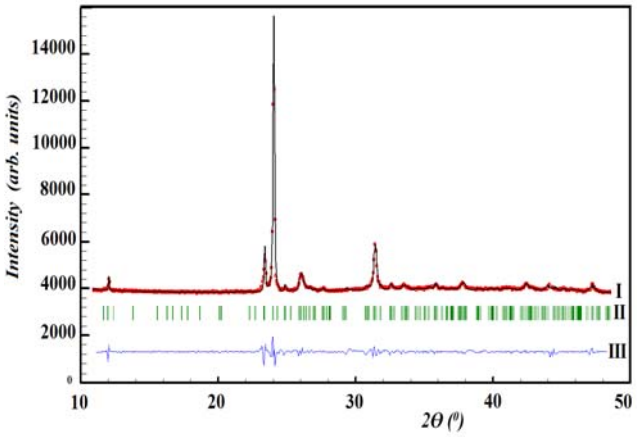


Figure 5. X-ray diffraction pattern of $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ powder (x = 0.01). I – comparison of the observed pattern with the fitted pattern, II – Bragg peaks, III – the difference between the observed pattern and the fitted pattern.

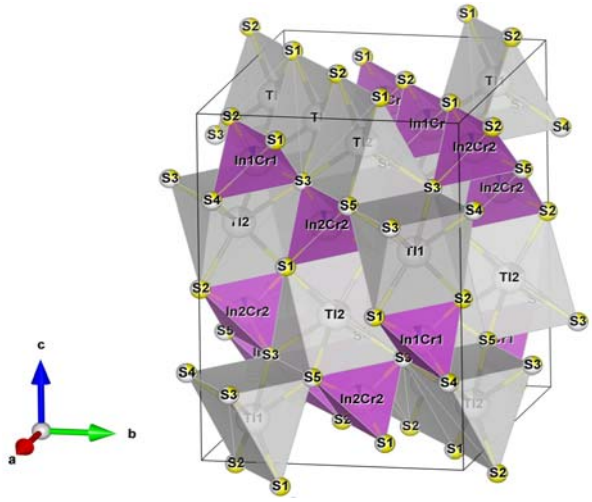


Figure 6. Crystal structure of $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) (monoclinic structure of space group C2/c)

The results of calculating the X-ray diffraction pattern of powdered $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) irradiated with electrons with a fluence of 2×10^{17} electron/cm^2 showed that the crystal structure was preserved; corresponds to a monoclinic structure (space group C2/c) (Fig. 6). However, the coordinates of the atoms, as well as the parameters of the unit cell, compared to the initial one, have changed (in Table 2.).

Table 2. Positions and coordinates of atoms of the irradiated $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ powder (x = 0.01) in space group C2/c.

№	Atom	Atomic coordinates			Heat factor
		x/a	*y/b*	*z/c*	*B*
1	Tl	0.0310	0.1874	0.3828	0.842
2	Tl	0.2142	0.4416	0.1195	0.910
3	In	0.0998	0.1886	0.6550	0.951
4	In	0.1497	0.4378	0.8451	0.852
5	Cr	0.0998	0.1886	0.6550	0.151
6	Cr	0.1497	0.4378	0.8451	0.132
7	S	0.0482	0.3150	0.9447	0.319
8	S	0.1990	0.0624	0.5554	0.027
9	S	0.2392	0.1870	0.2504	0.290
10	S	0.0000	0.0523	0.7500	0.676
11	S	0.0000	0.4267	0.2500	0.509

a, Å	*b*, Å	*c*, Å	β, °	*a*, Å	*b*, Å
10.873	10.956	15.175	100.63	10.873	10.956

The size of the coherent X-ray scattering region corresponding to the average crystallite size was determined from the width of the diffraction reflections of the powder sample. To calculate the size of the coherent scattering region (CSR), a reflection with $2\theta_B$=23.8064° was selected and the full width at half maximum was calculated. For this, the Scherrer formula was used [23, 24]:

$$D = \frac{K\lambda}{\beta_S \cos\theta}. \qquad (1)$$

Calculations showed that the average crystallite size of the initial powder sample $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) is d = 36.87 nm. After irradiation of the sample with accelerated electrons with a fluence of 2×10^{17} electron/cm^2, the average crystallite size increased to d = 41.76 nm.

Earlier, it was found that the initial $TlInS_2$ single crystal is two-phase with hexagonal (space group $P6_3/mmc$) and monoclinic (space group C2/c) phases [3]. The arithmetic mean deviation of the profile of the initial $TlInS_2$ crystal is R_a = 19.8 nm, the mean maximum peak height is R_z = 387.6 nm. Powdered $TlInS_2$ with a monoclinic (space group C2/c) structure has the following parameters: a = 10.926 Å, b =

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

10.934 Å, c = 15.208 Å, β = 100.65°, and the average crystallite size is 54.7 nm.

After electron irradiation, the $TlInS_2$ single crystal passes from a two-phase state (space group $P6_3/mmc$ and space group C2/c) to a single-phase state with space group $P6_3/mmc$, the unit cell parameters are: $a = b$ = 10 Å, c = 14.923 Å [3]. It was found that the maximum value of the arithmetic mean deviation of the profile after irradiation with electrons 2×10^{17} electron/cm^2 was R_a = 48.1 nm, the average peak height R_z = 694.4 nm [3]. The results of the X-ray study of the $TlInS_2$ crystal in powder form after electron irradiation are as follows: a=10.881 Å, b= 10.955 Å, c=15.185 Å, and β=100.63° (space group C2/c) and the average crystallite size is 114.32 nm.

The initial $TlInS_xSe_{2-x}$ single crystal has a monoclinic structure (space group C2/c) (x = 1) [21] with a = 11.566 Å, b = 11.223 Å, c = 15.319 Å, and β=100.21°. Irradiation of a $TlInS_xSe_{2-x}$ single crystal (x = 1) with electrons with a fluence of 2×10^{17} electrons/cm^2 (energy 2 MeV) contributed to a change in the unit cell parameters with a = 10.969 Å, b = 11.06 Å, c = 15.327 Å, and β = 100.47°. And powder $TlInS_xSe_{2-x}$ (x = 1) consisted only of a monoclinic phase (space group C2/c) with a =11.109 Å, b=11.126 Å, c=15.35 Å and β=100.69° and with an average crystallite size of 56.5 nm. After electron irradiation with a fluence of 2×10^{17} electrons/cm^2, the structural state was preserved, the unit cell parameters underwent a slight change along the a axis, and the average crystallite size increased to 65 nm. Thus, it can be seen that the replacement of a part (50%) of sulfur atoms with selenium leads to a change not only in the lattice parameters, but also in the phase state and sizes of crystallites. And with a small substitution of chromium atoms for indium atoms (1%), the unit cell parameters and the crystallite size also change.

IV. Conclusions

It was found that the $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal (x = 0.01) has a hexagonal (space group $P6_3/mmc$) structure with the parameters a=3.958 Å, b=3.958 Å, c=14.922 Å and α = 90°, β = 90°, γ = 120°.

It was found that after irradiation of a $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ single crystal (x = 0.01) with electrons with a fluence of 2×10^{17} electron/cm^2, the original structure is retained, the maximum value of the mean arithmetic deviation of the profile increases by more than five times, and the height of the average roughness increases from R_z = 72.0 nm to R_z = 152.9 nm.

Powdered $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$, as in $TlInS_2$ has a monoclinic structure (space group C2/c) (Fig. 5) with unit cell parameters a=10.864 Å, b=10.948 Å, c= 15.151 Å, and β = 100.61°.

Irradiation with 2 MeV electrons and a fluence of 2×10^{17} electron/cm^2 of powder $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) promotes an increase in the crystallite size from 36.87 nm to 41.76 nm, which is most likely associated with a decrease in the interfaces.

It was shown that the $TlInS_2$, $TlInS_xSe_{2-x}$ (x = 1), and $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x = 0.01) powder samples contain a monoclinic structure (space group C2/c) and no structural transitions were found under electron irradiation, but the average crystallite size increased.

Литература (References)

[1] A.M. Panich. Electronic properties and phase transitions in low-dimensional semiconductors. J. Phys.: Condens. Matter **20**, 293202 (42p.p) (2008).

[2] A.U. Sheleg, V.G. Gurtovoy, V.V. Shevtsova, S.N. Mustafaeva, E.M. Kerimova. Vliyanie ioniziruyushego izlucheniya na dielektricheskie kharakteristiki monokristallov $TlInS_2$ i $TlGaS_2$. Fizika Tverdogo Tela **54**, 9 (2012).

[3] M.Yu. Tashmetov, F.K. Khallokov, N.B. Ismatov, I.I. Yuldashova, I. Nuritdinov, S.Kh. Umarov. Study of the influence of electronic radiation on the surface, structure and Raman spectrum of a $TlInS_2$ single crystal. Physica B: Condensed Matter **613**, 412879 (2021).

[4] M. Hanias, A.N. Anagnostopoulos, K. Kambas, J. Spyridelis. Electrical and optical properties of as-grown $TlInS_2$, $TlGaSe_2$ and $TlGaS_2$ single crystals. J. Mater. Res. Bull. **27**, 25-38 (1992).

[5] K.R. Allakhverdiev, T.G. Mammadov, R.A. Suleymanov, N.Z. Gasanov. Deformation effects in electronic spectra of the layered semiconductors $TlGaS_2$, $TlGaSe_2$ and $TlInS_2$. J. Phys.: Condens. Matter **15**, 1291-1298 (2003).

[6] S. Kashida, Y. Kobayashi. X-ray study of the incommensurate phase of $TlInS_2$. J. Phys.: Condens. Matter **11**, 1027 (1999).

[7] A.V. Gomonnai, I. Petryshynets, Yu.M. Azhniuk, O.O. Gomonnai, I.Yu. Roman, I.I. Turok, A.M. Solomon, R.R. Rosul, D.R.T. Zahn. Growth and characterization of sulphur-rich $TlIn(S_{1-x}Se_x)_2$ single crystals. Journal of Crystal Growth **367**, 35-41 (2013).

[8] I. Molina-Molina, R. Avila-Godoy, D.R. Acosta, A.J. Mora, G.E. Delgado, S. Paredes-Dugarte, Ch. Power, L. Nieves. Characterizatione structural del compuesto semiconductor laminar electronic de transmission de altaresolucion. Acta Microscopica **23**. 18-22 (2014).

[9] S.X. Umarov. Vliyanie struktury, sostava i vneshnix vozdeystviy na opticheskie, elektrofizicheskie i fotoelektricheskie osobennosti monokristallov tverdix rastvorov $TlInS_2$, $TlInSe_2$. Dis… dokt. fiz.-mat. nauk (Tashkent: IYaF AN RUz, 2004).

[10] A.U. Sheleg, V.G. Gurtovoy, V.V. Shevtsova, V.A. Aliev. Rentgenograficheskie issledovaniya kristallograficheskikh

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

kharakteristik tverdykh rastvorov $TlInS_xSe_{2-x}$. Kristallografiya **59**, No.2, 231-234 (2014).
[11] A.A.I. Nadjafov, O.Z. Alekperov, G.G. Guseinov. Preparation and properties of orthorhombic $TlInS_2$. Inorganic Materials **41**, 98-101 (2005).
[12] O. Alekperov, N. Mamedov, N. Safarov, V. Gasumov, A. Nadjafov. Gamma-radiation stimulated structural transition of monoclinic $TlInS_2$ to hexagonal phase. Japanese Journal of Applied Physics **50** (2011).
[13] S.X Agaeva, M.X. Alieva, E.M. Godjaev. Tverdie rastvori $TlIn_{1-x}Er_xS_2$, Neorgan. Material **29**, 181-182 (1993).
[14] S.X. Agaeva. Fiziko-khimicheskie svoystva $TlInS_2$–$TlErS_2$ i opticheskoe pogloshenie monokristallov $TlIn_{1-x}Er_xS_2$ (x = 0,001; 0,01; 0,04). Tezisy V Resp. Nauch. Konf. Fiziko-khimicheskiy analiz i neorganicheskoe materialovedenie (Baku, 1999).
[15] N.Z. Gasanov, E.M. Kerimova, F.M. Seidov, Yu.G Asadov, K.M. Guseynova, S.G. Djafarova. Rentgenograficheskiy analiz i kray opticheskogo pogloheniya tverdykh rastvorov $TlIn_{1-x}Er_xS_2$ (x = 0,01). Azərbaycan Milli elmlər Akademiyasinin xəbərləri. Fizika-texnika va riyaziyyat elmlari seriyasi, fizika va astronomiya №2. (2015).
[16] M.M. Zarbaliev. $TlIn_{1-x}Yb_xS_2$ solid solutions. Inorganic Materials **36**, No.5, 511-514 (2000).
[17] R.G. Veliyev, R.Z. Sadikhov, E.M. Kerimova, Yu.G. Asadov, and A.I. Jabbarov. Effect of the magnetic phase transition on the charge transport in layered semiconductor ferromagnets $TlCrS_2$ and $TlCrSe_2$. Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov **43**. No.9, 1175-1178 (2009).
[18] M.H.Yu. Seyidov, A.P. Odrinskii, R.A. Suleymanov, E. Acar, T.G. Mamedov, V.B. Alieva. Pyroelectric properties and structural defects of a layered $TlInS_2$ crystal doped with lanthanum. Fizika Tverdogo Tela **56**, No.10 (2014).
[19] R.G. Veliyev. The magneto-dielectric properties of condenced materials in the systems of $TlInS_2$-$TlCr(Fe,Co)S_2$, $TlGaSe_2$-$TlCr(Fe,Co)Se_2$. Azerbaijan Journal of Physics No.2 (2010).
[20] H.P. Klug, L.E. Alexander. X-ray diffraction procedures: for polycrystalline and amorphous materials. ISBN 0-471-49369-4. Wiley-VCH. May 1974. pp. 992.
[21] M.Yu. Tashmetov, F.K. Khallokov, N.B. Ismatov, I.I. Yuldashova, S.Kh. Umarov. Electronic irradiation of $TlInS_xSe_{2-x}$ (x=1): Morphology, structure and Raman scattering. International Journal of Modern Physics B **35**, No.28, 2150289.(2021). DOI:10.1142/S0217979221502891.
[22] M.Yu. Tashmetov, N.B. Ismatov, R.P. Saidov, Sh.M. Maxkamov. Kompleks radiatsionnoy obrabotki na baze uskoritelya elektronov “Elektronika U-003”. Voprosy atomnoy Nauki i Texniki (Xar’kov, Ukraina) №5, 91-97 (2017).
[23] J.I. Langford, A.J.C. Wilson, P. Scherrer. After Sixty Years: A survey and some new results in the determination of crystallite size. Journal of Applied Crystallography **11**, 102-113 (1978).
[24] I.I. Yuldashova, M.Yu. Tashmetov. The influence of electron beams to structure parameters of multi-walled carbon nanotube. Physica B: Condensed Matter **571**, 280-284 (2019).

$TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x=0.01) монокристалнинг структурасига, кристаллитлар ўлчамига ва юзасига тезлаштирилган электронларнинг таъсири

М.Ю.Ташметов[1], Ф.К. Халлоқов[1], Н.Б. Исматов[1], С.Х. Умаров[2]

[1]Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академияси Ядро физикаси институти, Мирзо-Улуғбек тумани, Улуғбек посёлкаси, Хуросон 1, 100214, Тошкент, Ўзбекистон
[2]Бухоро Давлат Тиббиёт Институти, А.Навоий кўчаси 1, Бухоро, Ўзбекистон

Бу ишда $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x=0.01) монокристалининг структурасига, кристаллитлар ўлчамига ва юзасига тезлаштирилган электронларнинг таъсири тадқиқ қилинган. $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x=0.01) монокристалини энергияси 2 МэВ бўлган электронлар билан 2×10^{17} электрон/см^2 флюенсда нурлантириши профилни ўртача арифметик оғишининг максимал қийматини R_a=5.4 нм дан R_a=25.2 нм га ошишига олиб келади, шунингдек, ўртача ғадир-будурлик баландлигининг R_z = 72.0 нм dan R_z = 152.9 нм гача ошишига олиб келади. Энергияси 2 МэВ бўлган электронлар билан 2×10^{17} электрон/см^2 флюенсда $TlIn_{1-x}Cr_xS_2$ (x=0.01) кукунини нурлантириш кристаллитлар ўлчамини 36.87 нм дан 41.76 нм гача ўсишга олиб келади, бу эса кристалдаги соҳалар чегаралари билан боғлиқ бўлиши мумкин.

Калит сўзлар: монокристал, кристаллар структураси, элементар катак, фазовий гуруҳ, электрон билан нурлантириш, флюенс, кристаллитлар ўлчами, ғадир-будурлик.

©Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan, 2021

Нейтронно-активационный анализ в экологических исследованиях объектов окружающей среды

Б.И. Курбанов*, Е.А. Данилова, Н.С. Осинская, С.Х. Хусниддинова, С.Ю. Турдиев, Н.Х. Хушвактов, Х.Ш. Фармонов

Институт ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан, ул. Хуросон, 1 ,100214, Ташкент, Узбекистан

Получена 24.12.2021

* Corresponding author: e-mail bkurbanov@inp.uz, Phone: +998 97 733 13 49

В статье приводятся результаты исследования по использованию инструментального нейтронно-активационного анализа для экологического мониторинга объектов окружающей среды Ташкентской области и г.Ташкента. Получены данные по макро- и микроэлементному составу почвы, воды, волос населения вокруг промышленных предприятий и оценены влияния на здоровья населения проживающих на этих территориях.

Ключевые слова: окружающая среда, нейтронно-активационный анализ, макро- и микроэлементы, почва, вода, волос, нейтронный поток, гамма-спектр, экологический мониторинг.

The article presents the results of research using the instrumental neutron activation analysis for monitoring the state of environment in the Tashkent region and the Tashkent city. Data on the macro- and microelement composition of soil, water, hair of the population around industrial enterprises were obtained, and the impact of these data on the health of the population living in these territories was assessed.

Keywords: environment, neutron activation analysis, macro- and microelements, soil, water, hair, neutron flux, gamma spectrum, environmental monitoring.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.290

I. Введение

Решение задач по развитию различных отраслей промышленности и сельского хозяйства создают дополнительные техногенные нагрузки на экосистему, которые приводят не только к ухудшению состояния окружающей среды, но и отражаются на здоровье проживающего в этих регионах населения. Поэтому экологические исследования различных объектов окружающей среды являются актуальной задачей как науки, так и медицины. Основой экологических исследований являются систематические наблюдения за состоянием окружающей среды, мониторинг ее изменений под воздействием природных и антропогенных факторов, и влияние на состояние здоровья населения [1-3].

Источником наибольшего количества загрязнителей окружающей среды являются предприятия химической, нефтехимической, горно-металлургической промышленностей [4]. Анализ состояния и оценка токсического вклада промышленных предприятий является основной задачей проведения экологического мониторинга окружающей среды. С этой целью в последние годы различными природоохранными учреждениями проводятся широкомасштабные мероприятия по мониторингу этих объектов. Однако комплексное, многофакторное изучение состояния окружающей среды с анализом различных объектов и взаимосвязи полученных результатов со здоровьем населения проводится крайне редко.

Важнейшей задачей мониторинга является анализ экологической обстановки и ее динамики, т.е. выявление пространственной изменчивости факторов природной среды, воздействующих на здоровье человека и состояние экосистем [5]. Для достижения этой цели требуется выполнить сбор, анализ, оценку и территориальную интерпретацию трудно сопоставимой экологической информации. Косвенным, но весьма информативным признаком элементной нагрузки на организм человека, включая общую экологическую обстановку, профессиональные условия, питание и, как результат, состояние здоровья, является элементный состав волос человека [6, 7].

Существуют различные аналитические методы контроля состояния окружающей среды (почвы, питьевой воды, растений). Применение для этой цели ядерно-физических, аналитических методов, в частности, активационного анализа, одним из преимуществ которого является близость методологических подходов для определения элементов в различных объектах, дает возможность разработки методик многоэлементного анализа.

Другими преимуществами указанного метода является возможность анализа без разложения образца, многоэлементность, высокая чувствительность и независимость от типа исследуемых образцов. Кроме того, инструментальный вариант нейтронно-активационного анализа практически свободен от погрешностей за счёт загрязнения образца во время подготовки к анализу. Таким образом, активационный анализ в настоящее время является одним из наиболее удобных методов исследования, позволяющим определять большое количество элементов в небольших навесках проб, в частности, почве, воде, волосах населения.

Цель исследования – разработка унифицированной инструментальной нейтронно-активационной методики для проведения мониторинга и оценки экологической ситуации с учетом заболеваемости населения Ташкента и Ташкентской области.

II. Объект и метод исследования

Ташкентская область площадью 15.3 тыс. кв. км расположена в северо-восточной части Узбекистана. В области располагаются предприятия цементной промышленности, производства цветных (цинк, медь) и тугоплавких (молибден, вольфрам) металлов, производства азотных и фосфорных удобрений. На территории области имеются выведенные из эксплуатации урановые рудники. Недра области богаты медью, бурым углем, молибденом, цинком, золотом, серебром, редкоземельными металлами и др.

Ведущей отраслью промышленности в городе Ташкенте является машиностроение, кроме этого, развиты легкая, пищевая, химическая, фармацевтическая, строительная и др. отрасли. Город и область разделены на районы [8].

Проблема определения усредненных значений загрязненности атмосферного воздуха, поверхностных вод, почв и т.д. является исключительно сложной и трудоемкой, и оценка экологической ситуации с учетом заболеваемости населения в пределах отдельно взятого региона достаточно проблематична.

Для определения усредненных значений загрязненностей использован нейтронно-активационный анализ, который позволяет определять значительное число элементов в различных образцах с исключительно высокой чувствительностью. В каждом районе Ташкента и Ташкентской области было определено 10–15 точек отбора проб воды, почвы и волос человека. Методика подготовки образцов была подробно описана ранее [9].

Для экологических исследований наиболее эффективным является инструментальный нейтронно-активационный метод анализа (ИННА), обладающий высокой чувствительностью, производительностью и многоэлементностью [10, 11].

Инструментальный нейтронно-активационный анализ проводили на базе ядерного реактора типа ВВР-СМ Института ядерной физики АН РУз. В работах [12-14] с использованием ИННА показаны возможности исследования макро- и микроэлементного состава практически всех объектов окружающей среды: почва, питьевая вода, растения, продукты питания, фрукты, овощи, выращиваемые на данной территории, и волосы жителей исследуемых территорий. Экологическими объектами исследований являются почва, вода, растительность, атмосферный воздух, микроорганизмы, ткани животных и человека [15-16].

Среди токсичных веществ по данным МАГАТЭ наиболее вредными для здоровья человека считаются: 1) радионуклиды, 2) токсичные неорганические химические соединения, 3) природные токсины (бактериальные токсины, микотоксины и др.), 4) органические загрязняющие вещества

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

(нефтепродукты, пестициды, диоксины и др) и 5) химические элементы из группы тяжелых металлов [16, 17]. Исследованию объектов окружающей среди с использованием ИНАА посвящены работы [18-24]. Несмотря на это, объектов для изучения достаточно много.

III. Экспериментальная часть

Исследуемые пробы были подготовлены по стандартной процедуре, принятой для данного аналитического метода анализа элементного состава вещества. В качестве источника нейтронов использовали ядерный реактор типа ВВР-СМ ИЯФ АН РУз.

ИННА – многоэлементный анализ, и для определения содержания элементов по радионуклидам с различными периодами полураспада приходится применять различные временные режимы (время облучения, остывания, измерения).

Так, для короткоживущих радионуклидов с периодом полураспада ($T_{1.2}$) от нескольких минут до нескольких часов I, Cl, Mn, Cu, Na, K. образцы облучали в вертикальном канале реактора ВВР-СМ ИЯФ АН РУз потоком нейтронов $n\times10^{13}$ нейтрон/см^{2}сек в течение 30 сек. Измерение гамма-спектров наведенной активности образцов проводили дважды – через 10–15 мин после облучения для определения содержания магния, йода и хлора и через 4 часа для определения содержания натрия, меди, калия и марганца.

Для определения среднеживущих радионуклидов с периодом полураспада от суток и до 10 суток Ca, Au, Br, La, U, Cd, As были выбраны следующие режимы: $t_{обл}$ = 20 час; $t_{охл}$ = 10 дней, $t_{изм}$ = 200–300 с.

Для определения Se, Hg, Cr, Hf, Sr, Ag, Ni, Sc, Rb, Fe, Zn, Co, Sb по долгоживущим нуклидам $T_{1/2}$>10 суток, те же пробы выдерживали для остывания в течение $t_{охл}$= 30 суток, после чего проводили измерения каждого образца в течение 400–600 с.

Регистрацию наведенной активности облученных образцов проводили с использованием детектора из германия высокой чистоты (V=120 см^3), имеющего энергетическое разрешение, равное 1.8 КэВ по гамма-линии Co-60 (1333 кэВ) и гамма-спектрометр высокого разрешения (фирмы Canberra Industries Inc., США) с компьютерным программным обеспечением по управлению гамма-спектрометром и обработке гамма-спектров Genie-2000.

Максимальная погрешность активационного метода определения содержания элементов не превышала 12%. Точность и правильность определения того или иного элемента проверяли сравнением полученных данных с аттестованными значениями стандартов МАГАТЭ Algae IAEA 0393 и Lichen IAEA 336, а также NIST Standard Reference Material 1572 – CITRUS LEAVES [25].

Проведенные исследования позволили определить более 25 химических элементов в различных исследуемых объектах. Статистическую обработку данных выполняли с помощью пакета программ Microsoft Excel 2007 и Statistica 6.0.

IV. Результаты измерения и их обсуждение

В табл. 1 представлены средние значения результатов анализа почв в г. Ташкенте и Ташкентской области, из которой видно, что по сравнению с распространенностью в земной коре в исследуемых нами почвах повышено содержание мышьяка, кальция, бария, кобальта, калия, натрия, тория, урана и цинка.

Повышенные содержания натрия, калия, кальция и бария связаны с характером самих почв, что же касается мышьяка, кобальта, цинка и урана, то повышенные содержания этих элементов в некоторых районах области связаны с промышленностью, развитой в этих районах.

При этом распределение данных элементов по территории района и города неравномерно. На рис. 1 в качестве примера показано распределение цинка в почвах Ташкентской области.

Повышенное содержание цинка, выявленное в Ташкентском, Зангиотинском, Янгиюльском районах до 100 мкг/г, возможно, связано с развитой промышленностью в этих районах. Резко повышенные концентрации цинка (более 100 мкг/г) в Среднечирчикском и Ахангаранском районах связаны с деятельностью Алмалыкского горно-металлургического комбината, в Пскентском и Бекабадском районах – с промышленной деятельностью Бекабадского металлургического комбината, а также с процессами атмосферного переноса из г. Алмалыка. Полный перечень с нумерацией районов представлен на рис. 1.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Таблица 1. Среднее содержание элементов в почвах Ташкента и Ташкентской области, (мкг/г).

Элемент	г. Ташкент	Ташкентская область	Распространенность [8]	Элемент	г. Ташкент	Ташкентская область	Распространенность [8]
As	8,5±0,20	8,9±1.9	5-6	Mn	625±17	640±64	850
Au	0,015±0,0013	0,022±0,015	-	Mo	2,1±0,13	2,6±0,65	2,0
Ba	750±26	560±170	500	Na%	1,0±0,026	1,1±0,15	0,6-0,63
Br	3,3±0,26	4,4±1,5	5,0	Ni	160±8,5	30±29	40
Ca%	9,3±0,39	10±2,5	1,37-1,5	Rb	120±2,5	93±26	100
Ce	57±1,5	54±14	50	Sb	2,1±0,17	1,4±0,51	2,0-10
Co	10±0,19	9,8±3,4	8,0	Sc	10±0,23	10±3,6	7,0
Cr	64±2,1	50±22	200	Sm	4,8±0,085	4,8±0,64	-
Cs	5,8±0,10	5,6±1,8	5-6	Sr	370±18	250±44	300
Eu	1,0±0,022	1,0±0,31	-	Ta	1,0±0,022	0,84±0,25	-
Fe%	3,3±0,15	2,7±0,79	3,8-4,0	Tb	0,59±0,010	0,52±0,16	-
Hf	7,6±1,6	5,7±1,7	6.0	Th	14,5±0,59	12±2,9	5,0-6,0
K%	1,9±0,069	2,1±0,41	1,4-1,5	U	3,7±0,13	3,5±0,56	1,0
La	40±1,4	51±8,0	30-40	Yb	2,3±0,074	2,0±0,36	-
Lu	0,26±0,012	0,34±0,040	-	Zn	175±24	96±29	50

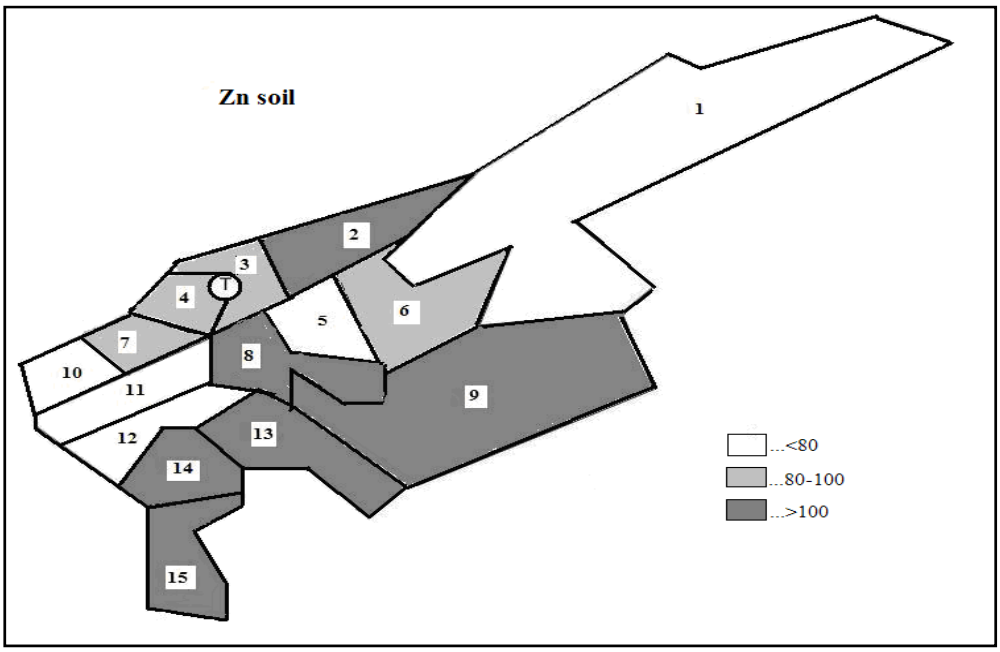


Рисунок 1. Распределение цинка в почвах Ташкентской области, мкг/г: 1 – Бостанлыкский, 2 – Кибрайский, 3 – Ташкентский, 4 – Зангиотинский, 5 – Верхнечирчикский, 6 – Паркентский, 7 – Янгиюльский, 8 – Среднечирчикский, 9 – Ахангаранский, 10 – Чиназский, 11 – Нижнечирчикский, 12 – Аккурганский, 13 – Пскентский, 14 – Букинский, 15 – Бекабадский, Т – Ташкент.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

В целом, в почвах по Ташкенту наблюдаются сравнительно близкие значения найденных концентраций элементов, что объясняется относительным геохимическим однообразием сравнительно ограниченной территории, однако в ряде районов города повышено содержание цинка, молибдена, брома, никеля, что может быть объяснено дальним переносом выбросов производств г. Алмалыка.

Анализ питьевых (водопроводных вод) также показал неравномерное распределение значений содержания элементов по районам области. Вместе с тем все значения находятся в пределах предельно допустимой концентрации для питьевых вод.

Выявлены существенные колебания хлора (2.6–106 мг/л), сурьмы (0.19–0.87 мкг/л), железа (2.8–44 мкг/л), а также урана (1.2–23 мкг/л), что, вероятнее всего, является следствием воздействия как отработанных урановых производств, так и выносом урана с промывными водами, содержащегося в фосфорных удобрениях.

Несмотря на строгий контроль питьевой воды, ее элементный состав по районам города Ташкента (табл. 2) также представляется неоднородным, возможно, из-за наличия различных источников водоснабжения. Определенный интерес вызывают вариации содержания хлора в питьевой воде (1.6–2.8 мг/л), несмотря на то, что техника и уровни хлорирования питьевой воды стандартизованы и контролируются. Повышенное содержание железа в питьевой воде города вероятнее всего связано с коррозийными процессами в трубах.

Таблица 2. Среднее содержание элементов в питьевой воде г. Ташкента и Ташкентской области, мкг/л.

Элемент	г. Ташкент	Ташкентская область	ПДК	Элемент	г. Ташкент	Ташкентская область	ПДК
Ag	<0,01	0,1±0,016	25	La	0,19±0,032	0,6±0,081	
As	0,83±0,086	0,80±0,011	10	Lu	0,014±0,0062	0,017±0,0029	
Au	0.015±0.00071	0.026±0.0028		Mg%	0,84±0,062	3,2±0,91	
Ba	95±4.2	65±14	100	Mn	29±1,9	31±9,5	50
Br	3.4±0,17	93±14	200	Mo	3,1±0,27	11±2,5	70
Ca%	4,3±0,2	15±1,9	-	Na%	0,45±0,056	5,2±1,3	20
Ce	0,36±0,059	0,074±0,011		Ni	4,9±0,79	<1,0	
Cl%	0,19±0,011	3,3±0,79		Rb	0,88±0,1	0,69±0,10	
Co	0,15±0,016	0,29±0,040	100	Sb	0,43±0,044	0,37±0,058	
Cr	1,9±0,15	5,5±1,8	50	Sc	0,050±0,012	0,011±0,0022	
Cs	0,047±0,0080	0,046±0,031		Se	<0,01	1,8±0,56	
Eu	0,012±0,0012	0,0036±0,0013		Sr	340±14	1700±540	
Fe	240±39	8,9±2,7	300	Tb	0,0044±0,0011	<0,001	
Hf	0,080±0,041	0,01±0,0014		Th	0,057±0,013	<0,01	
Hg	<0,01	0,015±0,0055		U	2,2±0,14	10±1,5	
				Zn	26±3,4	19±3,6	5000

Результаты анализа волос жителей Ташкентской области (табл. 3) показали, что в ряде районов (8, 9, 15) в 2−3 раза, по сравнению соседними, повышено содержание хрома (1.4±0.095 мкг/г), кобальта (0.25±0.015 мкг/г), сурьмы (0.16± 0.011 мкг/г), урана (0.60±0.041 мкг/г). Элементный состав волос неоднороден также по районам города Ташкента. Отношение максимального значения к минимальному составляет 50 для бария, 25 для хлора, 5 для ртути, 15 для калия, 5 для натрия, 8 для стронция. По другим элементам различия меньше, но все же существенны. Предполагается, что это может быть связано с существованием в районах как загрязняющих окружающую среду предприятий, так и с условиями труда жителей.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Таблица 3. Содержание элементов в волосах жителей Ташкента и Ташкентской области, мкг/г.

Элемент	г. Ташкент	Ташкентская область	Референтные значения	Элемент	г. Ташкент	Ташкентская область	Референтные значения
Ag	0,15±0,044	0,12±0,038	0,1- 0,25	I	4,2±1,1	1,6±0,56	0,8-1,5
As	<0,1	0,13±0,042	0,1-0,3	K	360±99	510±180	800-1000
Au	0,066±0,026	0,029±0,013	0,02-0,05	La	0,025±0,0019	0,057±0,0059	0,02-0,04
Ba	33±15	96±61	1,0-5,0	Mn	1,3±0,21	1,8±0,17	0,35-1,0
Br	1,8±0,28	2,7±0,40	1,0-3,0-	Na	540±180	1400±550	250-800
Ca	2200±360	4200±1100	1000-1500	Rb	0,62±0,14	0,42±0,093	0,5-1,0
Cl	1600±600	4200±1600	1000-2000	Sb	0,084±0,006	0,067±0,0082	<0,2
Co	0,036±0,0031	0,084±0,019	0,05-0,1	Sc	0,012±0,0047	0,013±0,0013	0,006-0,015
Cr	0,44±0,025	0,50±0,076	0,35-1,0	Se	0,37±0,019	0,30±0,030	0,35-1,0
Cu	8,8±0,97	12±1,5	15-20	Sr	25±6,6	41±12	<10
Fe	33±1,5	50±3,7	20-30	U	0,13±0,011	0,18±0,038	<0,3
Hg	0,066±0,011	0,044±0,0046	0,1-0,3	Zn	227±34	140±6,7	150-250

Как известно, заболеваемость населения в значительной мере связана с состоянием окружающей среды. Для изучения взаимосвязи среды обитания и здоровья проведен корреляционный анализ между содержанием элементов в объектах окружающей среды и заболеваемостью. Полученные от МЗ РУз данные о заболеваемости позволили построить картограммы распределения различных заболеваний по районам города и области, а корреляционный анализ показал, что наблюдаются значительные корреляции как для литофильных элементов, так и для биологически значимых микроэлементов, а также для элементов, биологическая роль которых мало изучена.

Так, недостаток никеля в почве может явиться причиной заболеваемости крови и эндокринной системы (r=–0.63; r=–0.55; доверительная вероятность анализа P=0.95). Избыток токсичной сурьмы может привести к увеличению частоты психических заболеваний и заболеваний нервной системы (r=0.57; r=0.81; доверительная вероятность анализа P=0.95). Избыток цинка (незаменимого микроэлемента) может быть связан с ростом болезней нервной системы, систем кровообращения и мочеполовой (r=0.72, r=0.55, r=0.59; p<0.05). Избыток редкоземельных элементов (биологическая роль которых практически не изучена) может привести к поражению пищеварительной системы. В качестве примера на рис. 2 представлены картограммы распределения цинка в почвах и частоты заболеваемости нервной системы по районам города.

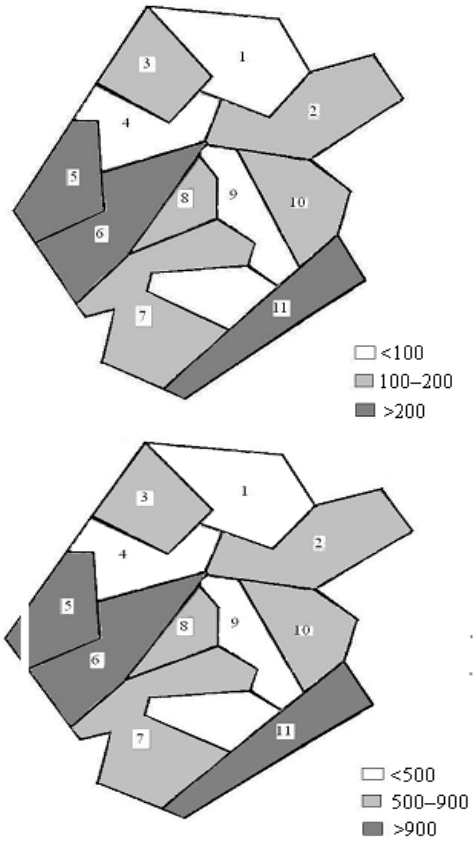


Рисунок 2. Картограммы распределения цинка в почве, мкг/г (верхний рисунок) и болезней нервной системы (нижний рисунок) по районам города в усл. ед.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Изучение корреляционных зависимостей между заболеваемостью и содержанием элементов в волосах жителей позволили выявить связь между содержанием железа и частотой психических расстройств (r=–0.56; p<0.05). Пониженные содержания кальция, кобальта, калия, натрия (конституционных элементов) и повышенные содержания цинка и ртути в волосах жителей могут быть связаны с заболеваниями эндокринной системы. Обнаружена положительная связь между содержанием меди и заболева-ниями системы кроветворения (r=–0.59; p<0.05). Заболевания системы пищеварения связаны с недостатком таких незаменимых элементов, как кобальт и цинк (r=–0.53; r=–0.59 соответственно при p<0.05).

V. Заключение

На основе разработанной инструментальной нейтронно-активационной методики проведен анализ почв, питьевых вод и волос жителей Ташкента и Ташкентской области. Рассчитаны средние содержания элементов в почве, питьевой воде и волосах жителей. Установлено крайне неравномерное распределение элементов в составе объектов на исследуемых территориях. Выявлены техногенно-напряженные районы, что обусловлено деятельностью промышленных предприятий. Проведен корреляционный анализ между исследуемыми объектами и заболеваемостью. Для некоторых заболеваний найдены статистически значимые корреляции для Na, K, Ca, Co, Fe и Zn в волосах.

Проведенный анализ показал, что возникновение заболеваний тех или иных систем человека находится в прямой зависимости от состояния окружающей среды, уровня и характера ее загрязнения.

Метаданные

Neutron-activation analysis in ecological research of environmental objects

B.I. Kurbanov, E.A. Danilova, N.S. Osinskaya, S.Kh. Khusniddinova, S.Yu. Turdiev, N.Kh. Khushvaktov, Kh.Sh. Farmonov

Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan.

The article presents the results of research using the instrumental neutron activation analysis for monitoring the state of environment in the Tashkent region and the Tashkent city. Data on the macro- and microelement composition of soil, water, hair of the population around industrial enterprises were obtained, and the impact of these data on the health of the population living in these territories was assessed.

Keywords: environment, neutron activation analysis, macro- and microelements, soil, water, hair, neutron flux, gamma spectrum, environmental monitoring.

Литература (References)

[1] N.A. Agadjanyan, A.V. Skalniy. Himicheskie elementy v srede obitaniya i ekologicheskiy portret cheloveka (Moskva, Izd-vo KMK, 2001).

[2] Yu.F. Babikova, V.V. Kolesnik, N.P. Roslyakov i dr. Mikroelementniy sostav volos naseleniya kak indicator zagryazneniya prirodoy i proizvodstvennoy sredoi. V kn.: Aktivatsionniy analiz: Metodologiya i primenenie (Tashkent, Izd-vo Fan, 1990).

[3] A.A. Kist. Fenomenologiya biogeokhimii i bioneorganicheskoy khimii (Tashkent, Fan, 1987).

[4] G.G. Onishenko. O hode raboty po vedeniyu sotsialno-gigienicheskogo monitoringa v 2000-2002 i zadachakh gossan-epid-slujby Rossiyskoy federatsii po ego sovershenstvovaniyu. Gigiena i Sanitariya No.3, 3-5 (2004).

[5] A.I. Perelman. Geokhimiya: Uchebnoe posobie dlya geologicheskikh universitetov (Moskva, Vysshaya Shkola, 1979).

[6] A. Chatt, S.A. Katz. Hair analysis, applications in the biomedical and environmental sciences (VCH Publishers, 1988).

[7] L.I. Zhuk, E.A. Danilova, T.Yu. Yashina, A.A. Kist. Human hair composition in environment мonitoring and мapping. Radionuclides and heavy metals in environment. Ed. M.V. Frontasyeva (Kluwer Academic Publishers, the Netherlands, 217-225, 2001).

[8] https://ru.wikipedia.org/wiki/ Tashkent.

[9] E.A. Danilova, N.S. Osinskaya, S.X. Husniddinova, Ya.A. Akhmedov. Elementniy sostav volos – indikator prirodno-tekhnogennoy obstanovki Tashkentskoy oblasti. Mikroelementi v meditsine No.3, 24-32 (2020).

[10] B.I. Kurbanov, E.A. Danilova, N. Hushvaktov i dr. Neutronno-aktivatsionniy analiz mikroelementnogo sostava hlebobulochnikh izdeliy funktsionalnogo naznacheniya. Meditsinskaya Fizika (RINTs) No.1, 119-122 (2021).

[11] M.V. Frontasyeva. Neutronno-aktivatsionniy analiz v naukakh o zhizni. Fizika elementarnykh chastits i atomnogo yadra **42**, No.2, 636-716 (2011).

[12] B.I. Kurbanov, Ya.A. Akhmedov, E.A. Danilova, N.S. Osinskaya, B.K. Kul'djanov. Ekologicheskiy monitoring nekotorikh territoriy Uzbekistana s ispol'zovaniem yaderno-fizicheskikh metodov. Ekologiya (Minsk, Belarus) No.2, , -36-40 (2020).

[13] B.I. Kurbanov, E.A. Danilova, Ya.A. Akhmedov, N.Kh. Hushvaktov, Kh.Sh. Farmanov. Ispol'zovanie instrumentalnogo neutronno-aktivatsionnogo analiza dlya ekologicheskogo monitoringa tekhnogennykh territoriy Uzbekistana. Materiali 21 mezhdunarodnoy nauchnoy konferentsii «Sakharovskie chteniya 2021 goda: ekologicheskie proble-

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

my XXI veka» (Minsk, Belarus, MGEI im. A.D. Sakharova BGU, 20-21 may 2021).
[14] A.V. Skalniy, I.A. Rudakov. Bioelementy v meditsine (Moskva, Mir, 2004).
[15] A.R. Jurakulov, A.M. Muzafarov, B.I. Kurbanov, Sh.R. Urinov. Radiation factors of uranium productions and their impact on the environment. Annals of R.S.C.B.(Scopus) **25**, Issue 4, 490-499 (2021).
[16] IAEA. NAHRES-75. Technical Report (Vienna, IAEA, 2003). p.1-173.
[17] G.V. Iyengar, K.S. Subramanian. Environmental biomonitoring: exposure assessment and specimen banking. ACS Symp. Ser. **654**, 1-18 (1997).
[18] W.D. Ehmann, D.E. Vance. Radiochemistry and nuclear methods of analysis (N.Y., John Wiley and Sons, 1991).
[19] M.V. Frontasyeva, E. Steinnes. Yarmonization of health related environmental measurements using nuclear and isotopic techniques (Vienna, 1997, P.301-311).
[20] A. Gaudry et al. The necessary role of neutron activation analysis as a bulk multielement method with respect to ICP-MS and ICP-OES for environmental and earth sciences studies. Lab. Pierre Sue. CEA Saclay, 2000.
[21] I.J. Roelandts. J. Radioanal. Nucl. Chem. **243**, No.1, 209Ä218 (2000).
[22] J.-L.Joron. PhD Thesis (The University of Paris VII, 2000).
[23] N.V. Baranovskaya, D.V. Shvetsova, A.F. Sudyko. Regionalnaya spetsifika elementnogo sostava volos detey, projivayushikh na territorii Tomskoy oblasti Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta **319**(1), 212-220 (2011).
[24] A.P. Avtsyn, A.A Zhavoronkov. Mikroelementozy cheloveka: etiologiya, klassifikatsiya, organopatologiya (Moskva, Meditsina, 1991).
[25] IAEA AQCS Catalogue for Reference Materials and Intercomparison Exercises (IAEA-336, Lichen; IAEA-375, Soil; Vienna, Austria).

Атроф мухит объектларини экологик тадқиқотида нейтрон-активацион тахлил

Б.И. Курбанов, Е.А. Данилова, Н.С. Осинская, С.Х. Хусниддинова, С.Ю. Турдиев, Н.Х. Хушвактов, Х.Ш. Фармонов

ЎзФА Ядро физикаси институти, Fanlar Академияси, Mirzo Ulug‘bek tumani, Ulug‘bek posyolkasi, Xuroson 1, 100214, Ташкент, Узбекистон.

Мақолада Тошкент вилояти ва Тошкент шахри атроф-мухит объектларини инструментал нейтрон-активацион тахлил қилиш бўйича олинган натижалар келтирилган. Саноат корхоналари атрофидаги тупроқ, сув ва шу худудда яшовчи ахоли соч намуналарида макро- ва микроэлементлар таркиби бўйича янги маълумотлар олинган ва шу худудда яшовчи ахоли саломатлигига таъсири бахоланган.

Калит сўзлар. Атроф мухит, нейтрон-активацион тахлил, макро- ва микроэлементлар, тупроқ, сув, соч, нейтронлар оқими, гамма-спектр, экологик мониторинг.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Влияние нейтронного излучения на электропроводность алюминиевого сплава САВ-1

Ш.А. Аликулов*, С.А. Байтелесов, Ф.Р. Кунгуров, Д.П. Таджибаев, Д.Д. Тожибоев

Институт ядерной физики Академии наук Республики Узбекистан, ул. Хуросон, 1 ,100214, Ташкент, Узбекистан

Получена 22.12.2021

* Corresponding author: e-mail alikulov@inp.uz, Телефоны: (8)-371-289-20-07

Исследована электропроводность конструкционного сплава САВ-1, облученного быстрыми нейтронами флюенсом 10^{17}–10^{19} н/см^2 в диапазоне температур 290–480 К. Установлена нелинейная зависимость удельного сопротивления от дозы и температуры. Показано, что чем больше доза облучения конструкционного материала САВ-1, чем больше флюенс нейтронов, тем больше образуются в кристаллической решетке пары Френкеля, вакансии и междоузельные атомы, и они уменьшают электропроводность материала.

Ключевые слова: электропроводность, сплав САВ-1, быстрые нейтроны, флюенс, удельное сопротивление, доза, кристаллическая решетка, пары Френкеля, точечные дефекты.

The electrical conductivity of the SAV-1 structural alloy, irradiated with fast neutrons with a fluence of 10^{17}–10^{19} n/cm^2, was investigated in the temperature range 290–480 K. A nonlinear dependence of the specific resistivity on dose and temperature was established. It is shown that the higher the irradiation dose of the SAV-1 structural material, the higher the neutron fluence, the more Frenkel pairs, vacancies and interstitial atoms, are formed in the crystal lattice, and they reduce the electrical conductivity of the material.

Keywords: electrical conductivity, SAV-1 alloy, fast neutrons, fluence, resistivity, dose, crystal lattice, Frenkel pairs, point defects.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.291

I. Введение

В последнее время во всем мире вырос интерес исследователей к реакторным материалам. В значительной степени безопасность и экономичность эксплуатируемых ядерных реакторов определяется поведением конструкционных материалов. В качестве конструкционных материалов в активной зоне большинства исследовательских реакторов используется сплав алюминия САВ-1 [1]. В сплавах под действием облучения развиваются различные радиационно-индуцированные структурные превращения, которые определяют изменение свойств материалов в процессе облучения и во многом определяют их радиационную повреждаемость [2, 3]. Эти процессы непосредственно связаны со свободной миграцией точечных дефектов, генерируемых облучением. При нейтронном облучении, наряду со свободно мигрирующими дефектами, возникают также вакансионные кластеры. Диффузионная длина мигрирующих радиационных дефектов зависит от типа и концентрации стоков точечных дефектов, которыми могут служить дислокации, вакансионные кластеры, межфазные границы. Одной из структурно чувствительных характеристик является электропроводность, величина которой может определять степень радиационного воздействия [4, 5].

II. Методика эксперимента

Исследования проводили на образцах алюминиевого сплава САВ-1 промышленной постав-

ки, имеющих цилиндрическую форму диаметром 8 мм и длиной 100 мм. Процентное соотношение элементов, входящих в состав сплава CAB-1, анализировали с помощью рентгеновского микроанализатора «Jeol» JSM 5910 IV (Япония). Плотность образцов CAB-1 определяли с погрешностью 0.1% по измерениям их массы на аналитических весах и линейных размеров с помощью микрометра.

Для облучения быстрыми нейтронами образцы размещали в вертикальном канале исследовательского реактора ВВР-СМ ИЯФ АН РУз [1]. Плотность потока быстрых нейтронов (E>0.1 MeV) в канале составляла 3.3×10^{12} н/см^{2}с. Температуру в канале поддерживали равной 318 K.

Величину электрического сопротивления образцов сплава CAB-1 измеряли четырехзондовым компенсационным методом при токе 1 mA. Удельное электрическое сопротивление ρ определяли из соотношения:

$$\rho = \frac{UR_{эт}S}{U_{эт}L}, \qquad (1)$$

где U и $U_{эт}$ – падение напряжения на измеряемом и эталонном образцах, $R_{эт}$ – сопротивление эталонной катушки, равное 0.01 Ом, S и L – соответственно поперечное сечение и длина образца. Погрешность определения ρ составляла примерно 0.1%.

Зависимость электрического сопротивления образцов CAB-1 от температуры исследовали с помощью печи электросопротивления в диапазоне 290–490 K. Температуру в печи изменяли со скоростью 2–5 K/мин и контролировали хромель-алюмелевой термопарой. Измерения проводили в режиме нагревания и охлаждения через 25 K с выдержкой 30 мин в каждой точке измерения. При этом температуру в измерительной камере поддерживали регулятором температуры в пределах ±0.5 K.

III. Результаты эксперимента и расчета

По результатам измерения массы и объема образцов определена плотность сплава, которая в среднем составила 2.88 г/см^3. Согласно рентгенографическому анализу, массовая доля основных элементов алюминия, кремния и магния в сплаве CAB-1 составила соответственно 97.6, 2.09 и 0.07%,. Массовая доля примеси железа составила 0.05%, никеля 0.04%, меди и цинка по 0.03%. Доля остальных примесей (B, Cd, Na, Ti и др.) составила менее 0.01% (в сумме менее 0.08%). Анализ показал также, что сплав CAB-1, как и чистый алюминий, имеет гранецентрированную кубическую структуру со средним параметром решетки a = 4.066 Å, который на 0.6% больше параметра решетки эталонного образца алюминия (4.0414.Å).

Такое различие легко объясняется, если предположить, что сплав CAB-1 представляет собой твердый раствор внедрения, поскольку кремний и магний не образуют химических соединений с алюминием [6]. Легирующие атомы кремния и магния располагаются в междоузлиях кристаллической решетки, увеличивая размер элементарной ячейки.

Для подтверждения указанного предположения рассчитана концентрация атомов n каждого изотопа (см. таблицу) в чистом алюминии и в исследованном сплаве CAB-1 по формуле:

$$n = \sum_1^m n_i = N_A \sum_1^m \rho_i \frac{A_i}{\mu_i}, \qquad (2)$$

где N_A – число Авогадро, μ_i – молярная масса соответствующего элемента, входящего в состав сплава с массовой долей A_i. В результате получена общая концентрации всех атомов n в сплаве и чистом алюминии, равная соответственно 6.41×10^{22} cm^{-3} и 6.02×10^{22} cm^{-3}.

Таблица. Элементный состава образца CAB- 1

Сплав	Элементный состав (% вес)					
	Al	Si	Mg	Ni	Fe	Cu
CAB-1	97.6	2.09	0.1	0.04	0.14	0.03

Зависимости удельного сопротивления сплава CAB-1 от температуры и дозы облучения приведены на рис. 1, 2 и 3.

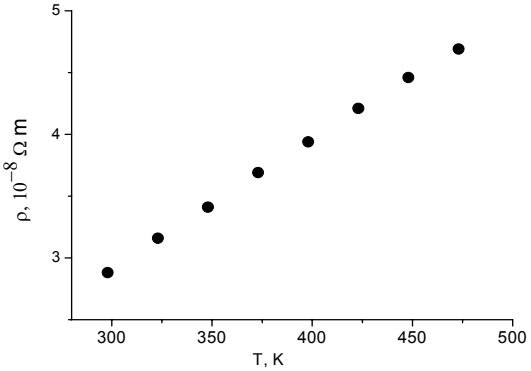


Рисунок 1. Температурная зависимость удельного сопротивления необлученного сплава CAB-1.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Видно, что в исследованном диапазоне температур электрическое сопротивление в необлученном образце сплава САВ-1 увеличивается с темпертатурой линейно.

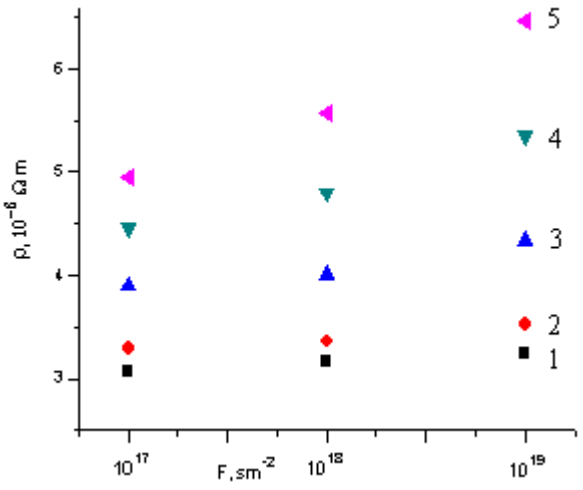


Рисунок 2. Зависимость удельного сопротивления сплава САВ-1 от флюенса нейтронов при температурах 298 K (1), 323 K (2), 373 K (3), 423 K (4) и 473 K (5).

Из рис. 2 видно, что в исследованном диапазоне флюенсов нейтронов удельное сопротивление сплава САВ-1 при всех температурах изменяется относительно слабо. При комнатной температуре оно практически не меняется с флюенсом (зависимость 1), увеличиваясь всего на 4%. Наибольшее изменение удельного сопротивления составляет 30% при температуре 473 K (зависимость 5).

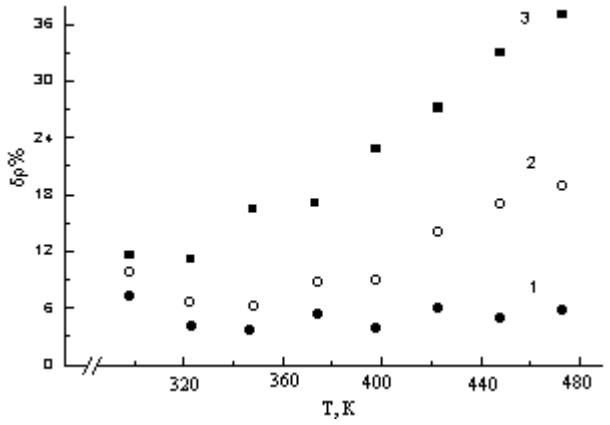


Рисунок 3. Относительное изменение удельного сопротивления сплава САВ-1 от температуры при флюенсах 10^{17} (1), 10^{18} (2) и 10^{19} cm^{-2} (3).

На рис. 3 наблюдаются максимумы, положение которых смещается при изменении дозы облучения.

Исследования показали также, что удельное сопротивление сплава САВ-1, не подвергнутого облучению, возрастает с температурой линейно, и нелинейно в образцах, получивших различные дозы нейтронного облучения.

IV. Анализ экспериментальных данных

В кристаллах твердых растворов внедрения атомы растворенных элементов располагаются в межатомных промежутках кристаллической решетки и приводят к местным искажениям кристаллической структуры сплава. Как следствие, увеличивается средний период решетки, что и наблюдается на опыте в алюминиевых сплавах [5, 7]. Искажения, вносимые в матрицу атомами внедрения, относительно велики из-за малых размеров пор [7], в которых размещаются примесные атомы магния и кремния, поэтому увеличение объема искаженной ячейки значительно [5]. В результате конкретная конфигурация кристаллической решетки сплава характеризуется тем, что одни поры заняты, а другие свободны. Поэтому раствор внедрения можно рассматривать как трехкомпонентную систему из металлических и внедренных атомов и пустых пор [6-9].

Температурная зависимость электропроводности сплавов должна определяться зависимостью подвижности носителей от температуры. В сплавах периодичность потенциала кристаллической решетки, нарушаемая тепловыми колебаниями, дополнительно нарушается беспорядочно распределенными атомами примесей. Это приводит к дополнительному рассеянию носителей заряда и уменьшению их подвижности [10, 11]. В результате величина удельного сопротивления сплава, как правило, выше удельного сопротивления металла, составляющего его основу, поскольку к сопротивлению ρ_T, обусловленному рассеянием на тепловых колебаниях решетки, добавляется остаточное сопротивление $\rho_{ост}$, вызванное структурными дефектами.

Согласно правилу Маттиссена об аддитивности сопротивления [12], общее удельное сопротивление определяется их суммой

$$\rho = \rho_{ост} + \rho_T. \qquad (3)$$

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

При этом температурный коэффициент сопротивления сплава $\alpha_{спл}$ можно представить в виде [13]:

$$\alpha_{спл} = \frac{1}{\rho_{ост} + \rho_T} \frac{d\rho_T}{dT}. \quad (4)$$

Выражение (4) получено в предположении о независимости $\rho_{ост}$ от температуры. Видно, что температурный коэффициент сопротивления сплава должен быть меньше α для чистого металла, причем тем меньше, чем больше $\rho_{ост}$ отличается от ρ_T. После простых преобразований из выражения (4) получается соотношение, позволяющее определить $\rho_{ост}$ для сплава:

$$\rho_{спл} = \rho_T \frac{\alpha - \alpha_{спл}}{\alpha_{спл}}. \quad (5)$$

Расчет по формуле (5) с использованием литературных данных по $\alpha = 0.0038$ K^{-1} и $\rho_T = 2.7\times10^{-8}$ Ω·m для чистого алюминия [12] и значения $\alpha_{спл} = 0.00354$ K^{-1} для необлученного сплава САВ-1, определенного экспериментально (рис. 1), дал значение $\rho_{спл} = 2.9\times10^{-8}$ Ω·m, которое хорошо совпадает с экспериментальным значением $\rho_{спл} = 2.88\times10^{-8}$ Ω·m для необлученного сплава САВ-1 в исследованном диапазоне температур.

V. Заключение

Таким образом, анализ полученных экспериментальных результатов позволил установить, что сплав САВ-1 по своей структуре является твердым раствором внедрения и что удельное сопротивление сплава изменяется нелинейно как от температуры, так и от дозы облучения. При этом с ростом флюенса нейтронов отклонение от линейной зависимости и соответственно скорость роста сопротивления сплава с температурой увеличиваются. Чем больше флюенс нейтронов при облучении конструкционного материала САВ-1, тем больше образуются в кристаллической решетке пары Френкеля, вакансии и междоузельные атомы, и соответственно уменьшается электропроводность материала.

Метаданные

Influence of neutron radiation on the electrical conductivity of the SAV-1 aluminum alloy

Sh.A. Alikulov, S.A. Baytelesov, F.R. Kungurov, D.P. Tadjibaev, D.D. Tojibaev

Institute of Nuclear Physics of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Mirzo Ulugbek district, Ulugbek township, Khuroson str., 1, 100214, Tashkent, Uzbekistan.

The electrical conductivity of the SAV-1 structural alloy, irradiated with fast neutrons with a fluence of 10^{17}–10^{19} n/cm^2, was investigated in the temperature range 290–480 K. A nonlinear dependence of the specific resistivity on dose and temperature was established. It is shown that the higher the irradiation dose of the SAV-1 structural material, the higher the neutron fluence, the more Frenkel pairs, vacancies and interstitial atoms, are formed in the crystal lattice, and they reduce the electrical conductivity of the material.

Keywords: electrical conductivity, SAV-1 alloy, fast neutrons, fluence, resistivity, dose, crystal lattice, Frenkel pairs, vacancies and interstitial atoms, point defects.

Литература (References)

[1] S.A. Baytelesov, F.R. Kungurov, B.S. Yuldashev. Analysis of different configurations of active zones reactor VVR-SM. Reports of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, **2**, 31-37 (2019).

[2] O.P. Maksimkin, A.V. Yarovchuk, D.S. Aulova, et al., Corrosion resistance of the aluminum alloy SAV-1 after operation the core of a VVR-K reactor and storage in a water pool. Voprosy Atomnoy nauki i Tekhniki **5**(96), 78-83 (2010).

[3] V.M. Lebedev, V.T. Lebedev, I.N. Ivanova, et al. Structure of aluminum alloys irradiated by neutrons in a reactor. Fizika Tverdogo Tela **52**, No.5, 934-936 (2010).

[4] S.A. Baytelesov, U.S. Salikhbaev, V.N. Sandalov, F.R. Kungurov, U.A. Khalikov. Electrical conductivity of aluminum alloys irradiated with neutrons. Atomnaya Energiya **109**, No.3, 148-152 (2010).

[5] Sh.A. Alikulov, F.R. Akhmedzhanov, S.A. Baytelesov, A.F.. Boltabaev, E.T. Rakhimov, U.S. Salikhbaev. Effect of neutron radiation on structure and electrical conductivity of aluminum alloys SAV-1. Uzbek Journal of Physics **17**, №4, 248-253 (2015).

[6] Aluminum alloys (properties, treatment, application). Spravochnik. Ed. Kh. Nil'sen. (Moscow, Metallurgiya, 1979)

[7] T.V. Yur'evich, K.T. Ivanova et al. Fizika metallov, teoreticheskaya podgotovka po distsipline, 2008, 292 c.

[8] Ya.S. Umanskiy, Yu.A. Skakov. Fizika metallov. Atomnoe stroenie metallov i splavov: uchebnik lkya vyzov. (Moscow, Atomizdat, 1978).

[9] S.E. Danilov, V.L. Arbuzov, B.N. Goshitsliy, A.E. Kar'kin, V.A. Pavlov, V.D. Parkhomenko. Voprosy Atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: fizika radiatsionnykh povrejdeniy i radiatsionnoe materialovedenie **90**, No.2, 43-47 (2007).

[10] V.M. Lebedev, V.T. Lebedev, S.P. Orlov et al. Investigation of nanosize structure of alloy SAV-1, irradiated with quick neutrons upto high fluencies by the method of low corner dispersion of neutrons. FTT **56**, No.1, 160-164 (2014).

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

[11] Kh.I. Kuntse. Metody fizicheskikh izmereniy (Moskow, Mir, 1989).
[12] A.P. Korolev, S.N. Barshetin. Materialy elektroniri i elektrotekhniki. Uchebnoe posobie. (Tambov, TGTU, 2010).
[13] Sh.A. Alikulov, F.R. Akhmedzhanov, S.A. Baytelesov, A.F. Boltabaev, F.R. Kungurov, E.T. Rakhimov, U.S. Salikhbaev. Electrical conductivity and thermal conductivity of aluminum alloys SAV-1 and AMG-2 at high temperatures. Atomnaya Energiya **117**, No.5, 270-273 (2015).

Алюмин қотишмаси САВ-1 нинг электр ўтказувчанлигига нейтрон нурланишининг таъсири

Ш.А. Аликулов, С.А. Байтелесов, Ф.Р. Кунгуров, Д.П. Таджибаев, Д.Д. Тожибоев

Ўзбекистон Республикаси Фанлар Академияси ядро физикаси институти, Хуросон кўчаси, 1-уй., 100214, Тошкент, Ўзбекистон

10^{17}–10^{19} н/см^2 флюенсларда нурлантирилган САВ-1 қотишмасини 290-480 К ҳароратлар оралиғида электр ўтказувчанлиги тадқиқ қилинди. Солиштирма қаршиликнинг ҳароратга ва дозаларга чизиқли бўлмаган боғлиқлиги ўрганилди. САВ-1 қобиқ материалининг нурланиш дозаси қанчалик катта бўлса, нурланиш оқими қанчалик кўп бўлса, шунча кўп кристалл панжарада Франкел жуфтлари – вакансиялар ва тугунлараро атомлар хосил бўлади ва улар материалнинг электр ўтказувчанлигини камайтириши кўрсатилди.

Калит сўзлар. электр ўтказувчанлик, САВ-1 қотишмаси, тез нейтронлар, флюенслар, қаршилик, доза, кристалл панжара, Френкел жуфт, вакансиялар ва тугунлараро атомлар, нуқтавий нуқсонлар.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Экспериментальное обоснование эффективности использования метода спектроскопии КР в процессе комплексных аналитических исследований

В.М. Ротштейн*, Х.Б. Ашуров, Р.Х. Ашуров

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Мирзо Улугбекский р-н, ул. Дўрмон йўли, 33, 100125, Ташкент, Узбекистан

Получена 07.12.2021.

* Corresponding author: e-mail vladimir.rotshteyn@gmail.com, Phone: +998 93 384 40 04

В работе продемонстрирована высокая эффективность использования Раман спектрометра при проведении комплексных исследований в составе аналитического оборудования. На примере анализа спектров КР образцов карбида кремния, по наличию спектральных полос 194, 777 и 827 см$^{-1}$, определена принадлежность образца монокристаллического карбида кремния к 4H политипу. Спектры КР образцов селенида кадмия использовали для контроля за аморфной и кристаллической фазами в пленках селенида кадмия. Отжиг образца селенида кадмия при температуре 800°C приводит к значительному уменьшению интенсивности спектральной полосы, соответствующей аморфной составляющей. Характерные изменения, происходящие в монокристаллическом кремнии в процессе имплантации бора с разной концентрацией, исследованы также методом спектроскопии КР. Детально рассмотрены уширения и смещения пика по частоте, свидетельствующие о возникновении напряжений, деформаций и дефектов в кристаллической решетке, являющихся результатом процесса ионной имплантации бора.

Ключевые слова: комплексные аналитические исследования, спектрометрия комбинационного рассеяния, политипы кристаллов, аморфный кремний, процесс имплантации.

The high efficiency of using the Raman spectroscopy method in complex investigations of a number of physical properties of research objects has been demonstrated. On the example of the analysis of the Raman spectra of silicon carbide samples, by the presence of spectral bands at 194 cm^{-1}, 777 cm^{-1}, and 827 cm^{-1}, it was determined that the sample of single-crystal silicon carbide belongs to the 4H polytype.The Raman spectra of cadmium selenide samples were used for monitoring the amorphous and crystalline phases in cadmium selenide films. It is shown that annealing of a cadmium selenide sample at a temperature of 800°C leads to a significant decrease in the intensity of the spectral band corresponding to the amorphous component. The characteristic changes occurring in single-crystal silicon during implantation with boron with different concentrations have been investigated by Raman spectroscopy. The issue of the observed broadening and frequency shift of the peak, which indicates the appearance of stresses, deformation, and defects in the crystal lattice, resulting from the process of ion implantation of boron, is considered in detail.

Keywords: complex analytical studies, Raman spectrometry, crystal polytypes, amorphous silicon, implantation process.

DOI: https//doi.org/10.52304/.v23i4.292

I. Введение

Получение наиболее полной информации о качественных и количественных характеристиках

исследуемых объектов, как правило, обеспечивается в рамках комплексных аналитических исследований. Эффективность таких исследований во многом зависит как от правильного выбора применяемых методов, так и от аналитических возможностей используемого оборудования. В связи с этим в процессе подготовки к комплексным аналитическим исследованиям необходимо произвести выбор приборов, оптимально соответствующих по возможностям своих технических характеристик требованиям решаемой задачи.

В качестве одного из наиболее универсальных вариантов такого выбора в настоящей работе рассматриваются возможности метода спектроскопии комбинационного рассеяния, реализуемые с помощью InViaRaman спектрометра производства компании «Renishaw», Великобритания.

Спектральный, или спектроскопический анализ – это физический или физико-химический метод установления химического состава и строения соединения, основанный на рассмотрении различных спектров атомов или молекул [1-8]. Данный анализ используется для изучения химических и физических особенностей веществ на фоне испускания или поглощения света. Одним из основных направлений таках исследований является качественный или количественный анализ изучаемых образцов [1, 2].

Сложность качественного спектрометрического анализа связана с наличием большого количества спектральных линий на аналитической спектрограмме. Процесс расшифровки и идентификации такой спектрограммы осуществляется благодаря наличию различных спектральных атласов с эталонными спектрами испускания и поглощения большого числа элементов, с указанием длин волн и относительных интенсивностей линий.

Задача количественного анализа – определение реального содержания конкретных элементов в анализируемом образце. При этом в методе количественного спектрального анализа используется тот факт, что интенсивность аналитической линии возрастает с увеличением содержания соответствующего элемента в исследуемом образце.

Как известно, спектроскопия комбинационного рассеяния (КР), так называемая рамановская спектроскопия, является спектроскопическим методом, предназначенным для изучения вращательных, колебательных и прочих низкочастотных мод анализируемого вещества в спектральном интервале, примерно, от 2 до 4000 $см^{-1}$.

Метод основан на явлении неупругого (комбинационного, рамановского) рассеяния монохроматического света в видимом, ближнем ИК или ближнем УФ, диапазонах. Спектроскопия комбинационного рассеяния дает бесценную возможность получения «отпечатков пальцев» молекул с помощью соответствующих аналитических исследований. В рамках таких исследований также возможен анализ изменений, происходящих в структуре молекулярных связей, связанных с изменением состояния, деформацией и напряжениями.

Метод КР напоминает инфракрасную спектроскопию, но обладает рядом положительных особенностей, таких как:

– неразрушающий, бесконтактный метод;

– полное отсутствие пробоподготовки;

– возможность регистрировать спектры веществ, находящихся в прозрачной для лазерного излучения упаковке;

– получение спектров объектов (доменов) размером от 1 мкм;

– прямая регистрация спектров от 5–10 $см^{-1}$ до 4000 $см^{-1}$ без пробоподготовки и в присутствии воды.

Изучение возможностей методик исследований, проводимых с использованием Раман спектрометра, осуществлялось нами в процессе проведения целого ряда экспериментов, причем для широкого круга исследуемых объектов и для самых различных областей применения. Результаты таких исследований представлены в настоящей работе.

II. Исследования и анализ результатов

Спектры комбинационного рассеяния монокристаллов карбида кремния различных политипов исследовались достаточно подробно в работах ряда авторов, к примеру [9, 10].

Хотя разные модификации кристаллов SiC мало отличаются по значениям многих параметров, так как представляют собой одинаковые слои кремния и углерода, составленные в несколько отличном порядке, что затрудняет их идентификацию по политипу, применяемый авторами метод комбинационного рассеяния позволял, за счет чувствительности метода к длительности кратных периодов в кристаллической решетке, четко фиксировать линии, соответствующие определенному политипу монокристаллов SiC.

Следует отметить, что метод комбинационного рассеяния позволяет выявить наличие даже ма-

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

лых включений политипов монокристаллов карбида кремния в исследуемых образцах.

Результаты исследований, представленные в [9, 10], были применены нами для интерпретации соответствующих спектров комбинационного рассеяния в процессе идентификации и качественного анализа образцов SiC.

Исследования проводились с помощью InVia Raman спектрометра производства компании «Renishaw», Великобритания.

Измерения вели при комнатной температуре. В качестве источника возбуждения применяли Cobolt CW 532 nm DPSS лазер с длиной волны излучения 532 нм и номинальной энергией 100 мВт, с использованием дифракционной решётки с периодом 1800 линий/мм, а в качестве регистрирующего устройства – штатный детектор Renishaw CCD Camera.

Для определения принадлежности образца монокристаллического карбида кремния к тому или иному политипу были использованы данные о положении линий в спектрах комбинационного рассеяния карбида кремния различных политипов, приведенные в работе [11]. Анализ полученного спектра показал, что спектр, представленный на рис. 1, демонстрирующий спектральные полосы 194 $см^{-1}$, 777 $см^{-1}$, 827 $см^{-1}$, достаточно уверенно согласуется с данными из [11], соответствующими монокристаллическому карбиду кремния 4H политипа.

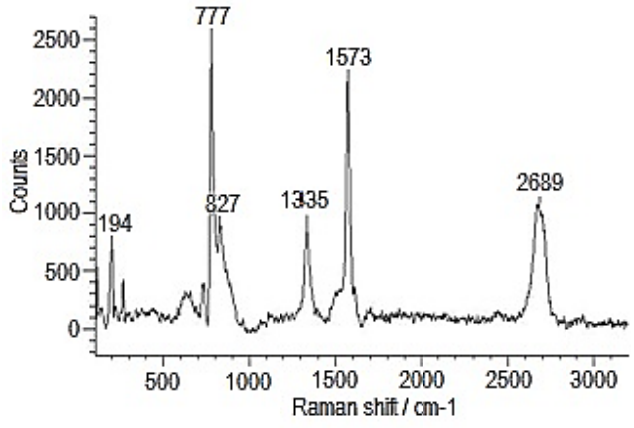


Рисунок 1. Спектр комбинационного рассеяния образца карбида кремния.

В проведенных нами исследованиях также использован тот факт, что спектроскопия КР, или рамановская спектроскопия, может быть применена в виде экспрессного неразрушающего метода анализа для определения характеристик объектов исследований, позволяющего по форме и положению пиков рамановского рассеяния оценить размер нанокристаллов и соотношение аморфной и кристаллической фаз, анализировать состав кристаллов и оценивать деформации и напряжения в кристаллах.

Образцы, имеющие пленочные покрытия из селенида кадмия CdSe, мы исследовали с использованием спектроскопии комбинационного рассеяния на InVia Raman спектрометре производства компании «Renishaw», Великобритания, при возбуждении линиями RL785 Class 3B Laser лазера с длиной волны излучения 785 нм.

На рис. 2 представлен спектр комбинационного рассеяния образца монокристаллического кремния с пленочным покрытием из селенида кадмия CdSe, нанесенным методом вакуумного испарения.

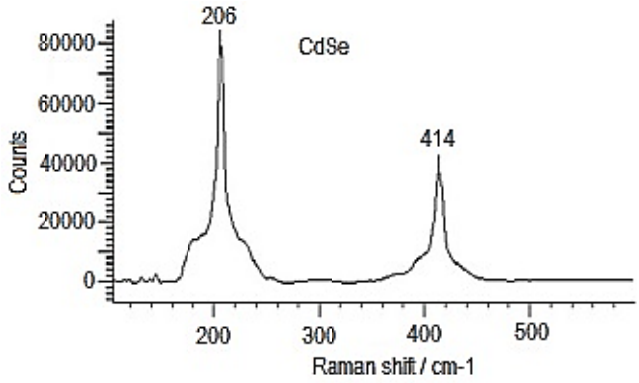


Рисунок 2. Спектр комбинационного рассеяния образца монокристаллического кремния с пленочным покрытием из селенида кадмия CdSe, нанесенным методом вакуумного испарения.

На рис. 3 представлен спектр комбинационного рассеяния образца монокристаллического кремния с пленочным покрытием из селенида кадмия CdSe, нанесенным методом вакуумного испарения, подвергнутого процедуре последующего отжига в вакууме при температуре 800°C.

Представленные на рис. 2 и 3 результаты хорошо согласуются с данными, приведенными авторами работы [12, 13]. Анализ полученных спектров, проведенный с использованием результатов и выводов, приведенных в работах [12, 13], позволяет предположить, что в спектре, изображенном на рис. 2, наблюдаются как моды аморфного селенида кадмия ~180 $см^{-1}$, так и моды, отвечающие за наличие кристаллической фазы в плёнке ~206 $см^{-1}$. Таким образом, из анализа спектра комбинационного рассеяния следует, что плёнка имеет аморфно-кристаллическую структуру.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

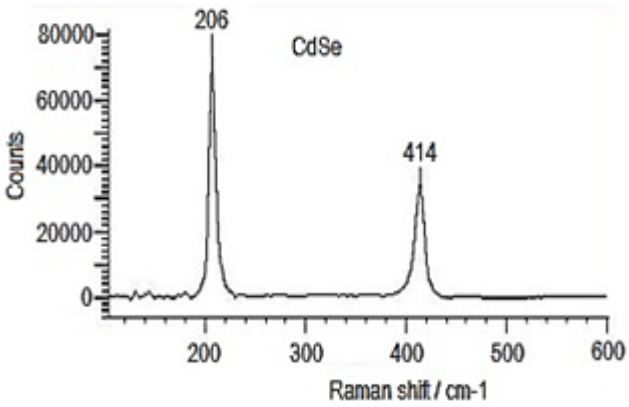


Рисунок 3. Спектр комбинационного рассеяния образца монокристаллического кремния с пленочным покрытием из селенида кадмия CdSe, нанесенным методом вакуумного испарения, подвергнутого процедуре последующего отжига в вакууме при температуре 800°C.

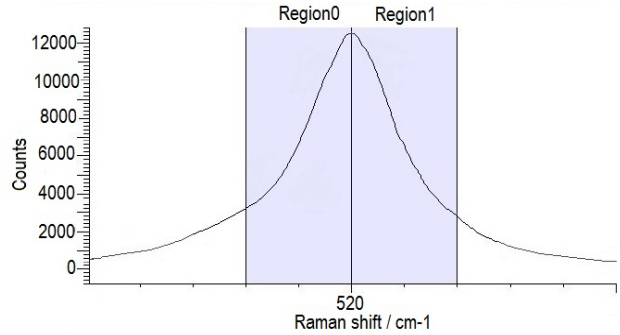
Следует отметить, что уширение полос комбинационного рассеяния, как правило, свидетельствует о структурных особенностях, в частности, степени кристалличности и качестве кристаллов, в нашем случае – структуры пленки селенида кадмия.

Последующий отжиг исследуемого образца при температуре порядка 800°C приводит к видоизменению соответствующего спектра комбинационного рассеяния (рис. 3), что свидетельствует о существенном восстановлении кристаллической структуры пленочного покрытия.

При необходимости, анализируя рамановский спектр селенида кадмия, можно определить соотношение аморфной и кристаллической составляющих в структуре пленки. Для этого достаточно вычислить интегральные интенсивности спектральных полос, соответствующих кристаллическому и аморфному пикам.

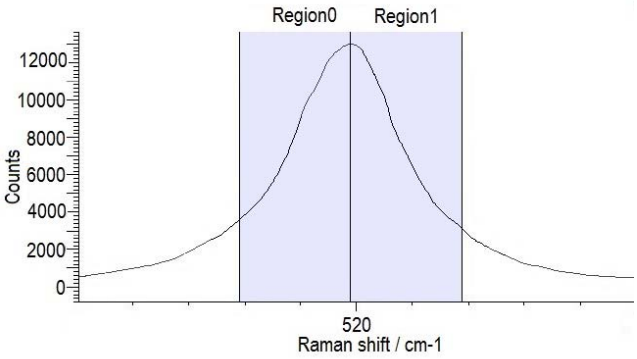
Методом спектрометрии КР нами исследованы и образцы монокристаллического кремния, имплантированные бором с разной концентрацией.

На рис. 4 представлен спектр комбинационного рассеяния образца чистого монокристаллического кремния. На рис. 5 представлен спектр комбинационного рассеяния образца монокристаллического кремния, имплантированного бором с концентрацией C_B=1.4×10^{14} cm^{-3}. На рис. 6 представлен спектр комбинационного рассеяния образца монокристаллического кремния, имплантированного бором с концентрацией C_B=4.55×10^{14} cm^{-3}.



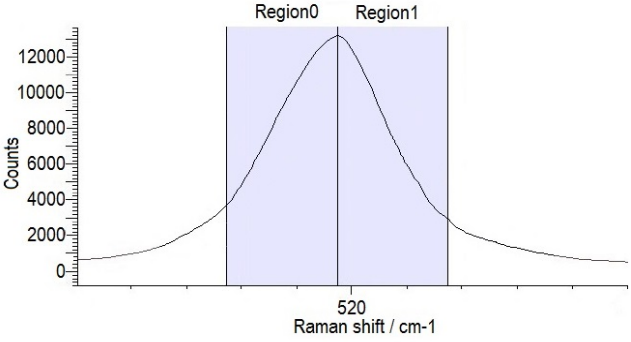
Region	Start	End	Width	Area
Region0	515.953	519.991	4.03769	31854.165240
Region1	519.959	523.997	4.03769	31465.777268

Рисунок 4. Спектр КР монокристаллического кремния, не прошедшего процедуру имплантации бором.



Region	Start	End	Width	Area
Region0	515.763	519.786	4.023	35864.043472
Region1	519.757	523.787	4.03	31652.249782

Рисунок 5. Спектр комбинационного рассеяния образца монокристаллического кремния, имплантированного бором с концентрацией C_B=1.4×10^{14} cm^{-3}.



Region	Start	End	Width	Area
Region0	515.482	519.489	4.007	38231.127202
Region1	519.475	523.496	4.021	31823.249781

Рисунок 6. Спектр комбинационного рассеяния монокристаллического кремния с концентрацией бора C_B=4.55×10^{14} cm^{-3}.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Анализируя полученные результаты, следует отметить, что в спектрах наблюдается изменение формы пика и его положения с характерной зависимостью от роста концентрации имплантированного бора.

Для более детального изучения наблюдаемых изменений спектра у каждого из этих спектров были определены интегральные интенсивности двух областей спектральной полосы монокристаллического кремния, расположенных слева (Region0) и справа (Region1) от частоты, соответствующей максимальной интенсивности пика, шириной 4 $см^{-1}$ каждая.

Очевидно, что сопоставляя значения отношений интегральных интенсивностей Region0 к соответствующим интегральным интенсивностям Region1, определенным для каждого спектра, можно получить важную информацию о имеющих место изменениях пика монокристаллического кремния.

В процессе анализа было определено, что значения отношений интегральных интенсивностей Region0 к соответствующим интегральным интенсивностям Region1 для чистого кремния составляют 1.012 для кремния, имплантированного бором с концентрацией C_B=1.4×10^{14} $см^{-3}$, и 1.133 для кремния, имплантированного бором с концентрацией C_B=4.55×10^{14} $см^{-3}$; отношение составляет 1.201.

Регистрируемый рост значения отношений интегральных интенсивностей подтверждает наблюдаемое нами для спектров образцов монокристаллического кремния, имплантированных бором, уширение пика с изменением его симметрии.

При этом наблюдается сдвиг пика по частоте и увеличение полуширины пика монокристаллического кремния, от образца чистого кремния, к образцам, имплантированным бором, с характерной зависимостью от роста концентрации имплантированного бора.

Все зарегистрированные нами изменения спектров комбинационного рассеяния образцов монокристаллического кремния, такие как изменение формы пика кремния и его смещение по частоте в спектре комбинационного рассеивания, являются результатом процесса ионной имплантации бора, приводящего к возникновению целого ряда факторов, влияющих на характеристики исследуемых образцов, напряжения, деформации и дефектов, в кристаллической решетке образца монокристаллического кремния.

Таким образом, полученные результаты наглядно демонстрируют возможность использования метода комбинационного рассеяния для контроля за такого рода изменениями в исследуемых образцах.

Представленные в настоящей работе аналитические возможности спектрометрии КР были эффективно использованы нами в процессе целого ряда исследований, проводимых с помощью InVia Raman спектрометра [14-17].

III. Заключение

На основании результатов проведенных исследований продемонстрирована высокая эффективность использования метода спектроскопии КР при проведении комплексных исследований.

Анализ спектров комбинационного рассеяния образцов карбида кремния, полученных с использованием InVia Raman спектрометра, показал присутствие спектральных полос, соответствующих 194 $см^{-1}$, 777 $см^{-1}$ и 827 $см^{-1}$, что обеспечило возможность определения принадлежности образца монокристаллического карбида кремния к 4H политипу.

На примере исследования образцов селенида кадмия показана возможность контроля за наличием аморфной и кристаллической фаз в пленках селенида кадмия методом комбинационного рассеяния. Получено, что отжиг образца селенида кадмия при температуре 800°C приводит к значительному уменьшению интенсивности спектральной полосы, соответствующей аморфной составляющей в спектре комбинационного рассеяния селенида кадмия.

Результаты исследования образцов монокристаллического кремния, имплантированных бором с разной концентрацией, проведенные с использованием спектроскопии КР, обеспечили возможность оценки влияния процесса имплантации бора на характеристики образцов. Так, если величина отношения интегральной интенсивности левой (Region0) области спектральной полосы к правой (Region1) для образца чистого кремния составила 1.012, то для образца кремния, имплантированного бором с концентрацией C_B=1.4×10^{14} $см^{-3}$ составила 1.133, а для образца кремния, имплантированного бором с концентрацией C_B=4.55×10^{14} $см^{-3}$; составила 1.201. Соответствующее этому несимметричное уширение пика, а также наблюдаемое смещение пика по частоте свидетельствуют о возникновении напряжений, деформаций и дефектов в кристаллической решетке, являющихся результатом процесса ионной имплантации бора.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

Данные результаты, представляющие лишь часть аналитических возможностей метода комбинационного рассеяния для исследования самых различных объектов, наглядно демонстрируют эффективность использования метода КР в процессе комплексных аналитических исследований.

Метаданные

Experimental substantiation of the efficiency of using the Raman spectroscopy method in the complex analytical studies

V.M. Rotshteyn, Kh.B. Ashurov, R.Kh. Ashurov

Arifov Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Uzbekistan Academy of Sciences, Durmon yuli st. 33, 100125, Tashkent, Uzbekistan

The high efficiency of using the Raman spectroscopy method in complex investigations of a number of physical properties of research objects has been demonstrated. On the example of the analysis of the Raman spectra of silicon carbide samples, by the presence of spectral bands at 194 cm^{-1}, 777 cm^{-1}, and 827 cm^{-1}, it was determined that the sample of single-crystal silicon carbide belongs to the 4H polytype.The Raman spectra of cadmium selenide samples were used for monitoring the amorphous and crystalline phases in cadmium selenide films. It is shown that annealing of a cadmium selenide sample at a temperature of 800°C leads to a significant decrease in the intensity of the spectral band corresponding to the amorphous component. The characteristic changes occurring in single-crystal silicon during implantation with boron with different concentrations have been investigated by Raman spectroscopy. The issue of the observed broadening and frequency shift of the peak, which indicates the appearance of stresses, deformation, and defects in the crystal lattice, resulting from the process of ion implantation of boron, is considered in detail.

Keywords: complex analytical studies, Raman spectrometry, crystal polytypes, amorphous silicon, implantation process

Литература (References)

[1] Ye.V. Alekseevskiy. Kolichestvenniy analiz: uchebnik, 4-e izd. (Moskva-Leningrad, Ximicheskaya literatura, 1953).
[2] A.A. Bataev. Fizicheskie metody kontrolya kachestva materialov, uchebnoe posobie; A.A. Bataev, V.A. Bataev, L.I. Tushinskiy, S.A. Kotorov, D.E. Butorin, D.A. Sukhanov, Z.B. Bataeva, A.I. Smirnov, A.V. Ploxov. Red. A.A. Bataev (Novosibirsk, NGTU, 2000).
[3] L.V. Vilkov. Fizicheskie metody issledovaniya v khimii (Moskva, MGU im. M.V. Lomonosova, 1996).
[4] L.V. Vilkov. Fizicheskie metody issledovaniya v khimii. Strukturnye metody i opticheskaya spektroskopiya, ucheb-nik. L.V. Vilkov, Yu.A. Pentin (Moskva, Vysshaya shkola, 1987).
[5] L.G. Pakhomov. Fizicheskie metody issledovaniya neorganicheskikh veshestv i materialov: uchebno-metodicheskiy material. L.G. Paxomov, N.G. Chernorukov, Ye.V. Suleymanov, K.V. Kirьyanov (Novgorod: NNGU, 2006).
[6] A.B. Remizov. Analiticheskoe prilojenie kolebatel′noy spektroskopii: rukovodstvo k NIR, UIRS, kursovym i diplomnym rabotam (Kazan′, KXTI, 1985).
[7] D.F. Gaynutdinova. Analiticheskaya khimiya i fiziko-khimicheskie metody analiza: konspekt lektsiy (Kazan′, KGEU, 2008).
[8] M.I. Lebedeva. Analiticheskaya khimiya i fiziko-khimicheskie metody analiza, uchebnoe posobie (Tambov, TGTU, 2005).
[9] D.W. Feldman, J.H. Parker, Jr., W.H. Choyke, L. Patrick. Phys. Rev. **170**, 698 (1968).
[10] D.W. Feldman, J.H. Parker, Jr., W.J. Choyke, L. Patrick. Phys. Rev. **173**, 787 (1968).
[11] I.G.Aksyanov, M.E. Kompan, I.V.Kul′kova. Fizika tverdogo tela **52**, No.9, 1724-1728 (2010).
[12] V.S. Vinogradov, G. Karchevski, I.V. Kucherenko, N.N. Mel′nik, P. Fernandes. Fizika tverdogo tela **50**, No.1, 159-162 (2008).
[13] Z.T. Kangю Nanotechnology **17**, 4477-4482 (2006).
[14] V.N Arustamov, R.Kh. Ashurov, V.M. Rotshteyn, Kh.B. Ashurov, I.Kh. Khudaykulov. Journal of Physics: Conference Series 1686, 012013 (2020), LaPlas 2020.DOI: https://doi.Org/10.1088/1742-6596/1686/1/012013
[15] V.M. Rotshteyn, Kh.B. Ashurov, R.Kh. Ashurov.. Uzbek Journal of Physics **22**, No.5, 314-324, (2020). DOI: https://doi.org/10.52304/.v22i5.197
[16] V.M. Rotshteyn, Kh.B. Ashurov, R.Kh. Ashurov. Journal of Applied Spectroscopy **88**, No.6, .851-855 (2021). Doi: https://doi.org/10.47612/0514-7506-2021-88-6-962-966
[17] V.M. Rotshteyn, Kh.B. Ashurov, R.Kh. Ashurov. Journal of Applied Spectroscopy **88**, No.4, 550-555 (2021). Doi: https://doi.org/10.1007/s10812-021-01232-1

Комплекс аналитик тадқиқотлар жараёнида Раман спектроскопияси усулидан фойдаланиш самарадорлигини экспериментал асослаш

В.М. Ротштейн, Х.Б. Ашуров, Р.Х. Ашуров

У.А. Арифов номидаги ион-плазма ва лазер технологиялари институти, Дўрмон йўли кўчаси 33, 100125, Тошкент, Ўзбекистон.

Амалга оширилган тадқиқотлар натижаларига кўра, комплекс тадқиқотлар ўтказишда Раман спектроскопияси усулидан фойдаланишнинг юқори самарадорлиги намоён бўлди. Кремний карбид намуналарининг Раман спектрларини таҳлил қилиш мисолида 194 $см^{-1}$, 777 $см^{-1}$ ва 827 $см^{-1}$ спектрал чизиқлар мавжудлиги билан 4H политипига тегишли бир кристалли кремний карбид

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.

намунаси аниқланди. Кадмий селенид намуналарининг Раман спектрлари кадмий селенид плёнкаларида аморф ва кристалл фазаларни кузатиш учун ишлатилган. 800°C ҳароратда кадмий селенид намунасини қиздирилиши аморф компонентга мос келадиган спектрал чизиқнинг интенсивлигини сезиларли даражада пасайишига олиб келиши кўрсатилган. Ҳар хил концентрацияли бор билан имплантация пайтида монокристалли кремнийда юзага келадиган характерли ўзгаришлар Раман спектроскопияси билан ўрганилди. Борнинг ион имплантацияси жараёнидан келиб чиқадиган кучланишлар, деформациялар ва кристалл панжарадаги нуқсонларнинг пайдо бўлишини кўрсатадиган чўққининг кузатилган кенгайиши ва частотасининг силжиши масаласи кўриб чиқилди.

Калит сўзлар: комплекс аналитик тадқиқотлар, Раман спектрометрияси, кристалл политиплари, аморф кремний, имплантация жараёни

©Академия наук Республики Узбекистан, 2021 г.