

# СЕКЦИЯ 3

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

### СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВА КЛАСТЕРОВ

#### АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ $Ga_mAs_n$

Н.Т.Сулаймонов, П.Л.Терещук

*Институт Ядерной Физики АН РУ, Ташкент*

В отличие от кластеров элементарных полупроводников типа кремния кластеры гетероатомных полупроводников, в том числе и бинарных, могут иметь гораздо большее количество возможных структур вследствие вариации соотношения различающихся атомов в них. Очевидный интерес представляет исследование зависимости свойств этих кластеров как от их размера и зарядового состояния, так и от стехиометрии. Было обнаружено, что даже наночастицы хорошо известных материалов, таких как кремний, обладают уникальными свойствами, которые отсутствуют в массивных образцах и могут быть использованы. Эти свойства зависят от размера, формы и других параметров наноматериалов. При изменении числа и взаимного расположения атомов в кластерах свойства последних претерпевают существенные изменения и их структура очень отличается от фрагмента объемного материала с соответствующим числом атомов. Это благодаря факту, что в маленьких кластерах наибольшее число атомов находятся на поверхности и кластеры имеют пониженное координационное число (число соседей). Это приводит к реконструкции фрагмента объемного материала, так что свободная энергия кластера становится минимальной.

Здесь приводятся результаты наших исследований свойств кластеров арсенида галлия  $Ga_mAs_n$  как в нейтральном, так и зарядовых состояниях (катионов и анионов). Представляемые результаты получены с помощью самосогласованного метода сильной связи в комбинации с методом молекулярной динамики.

Согласно нашим расчетам, четырех- и пятиатомные кластеры могут иметь по четыре разные геометрии в зависимости от зарядового состояния и стехиометрии. Выявлено, что захват или эмиссия электрона существенно

изменяют структуру кластеров, изменяя ее от трехмерной к двумерной и наоборот, например, для Ga<sub>5</sub> и Ga<sub>2</sub>As<sub>2</sub>;

В табл. 1. приведены возможные каналы распада четырех- и пяти- атомных кластеров на два фрагмента меньших размеров и соответствующие энергии, необходимые для такой фрагментации:

$$E_{\text{фрагм.}} = E(A_n B_m) - [E(A_{n'} B_{m'}) + E(A_{n''} B_{m''})]; \quad n' + n'' = n; \quad m' + m'' = m. \quad (1)$$

Отрицательные значения этой энергии (табл. 1.) указывают на нестабильность кластера относительно распада. В случае энергетической невыгодности такого распада (положительные значения энергии), он тем не менее может происходить с определенной вероятностью за счет внутренней энергии кластера. Эта энергия, очевидно, требуется и в случае энергетической выгодности распада, так как исходный и конечные кластеры обычно разделены энергетическим барьером.

Как видно из табл. 1, чистые кластеры галлия устойчивы относительно распада, в то время как чистые нейтральные кластеры мышьяка с большей вероятностью распадаются на меньшие фрагменты: на две нейтральные двухатомные молекулы в случае четырехатомного кластера, и на заряженные двухатомные и трехатомные кластеры – в случае пятиатомных кластеров. Катионы чистых кластеров в целом оказались более устойчивыми по сравнению как с нейтралами, так и анионами.

В случае гетероатомных кластеров, напротив, в целом более устойчивы относительно распада анионы. Здесь с наибольшей вероятностью фрагментируются как катионы, так и нейтралы кластеров GaAs<sub>4</sub>, Ga<sub>2</sub>As<sub>3</sub>, Ga<sub>3</sub>As<sub>2</sub>, особенно Ga<sub>2</sub>As<sub>3</sub>, причем нейтралы с большей вероятностью распадаются на два противоположно заряженных фрагмента.

Таким образом, доля заряженных кластеров фактически может быть значительной из-за большей устойчивости их относительно распада по сравнению с нейтральными кластерами, а также из-за их появления в результате распада последних.

Таблица 1

Возможные каналы и энергии фрагментации кластеров

Кластер	(+)	(0)	(-)
Ga <sub>4</sub>	Ga <sub>2</sub> (+)+Ga <sub>2</sub> (0); 5.122	Ga <sub>2</sub> (+)+Ga <sub>2</sub> (-); 3.539 Ga <sub>2</sub> (0)+Ga <sub>2</sub> (0); 3.816	Ga <sub>2</sub> (0)+Ga <sub>2</sub> (-); 3.734
Ga <sub>5</sub>	Ga <sub>3</sub> (+)+Ga <sub>2</sub> (0); 7.751 Ga <sub>3</sub> (0)+Ga <sub>2</sub> (+); 9.035	Ga <sub>3</sub> (+)+Ga <sub>2</sub> (-); 2.168 Ga <sub>3</sub> (-)+Ga <sub>2</sub> (+); 3.019 Ga <sub>3</sub> (0)+Ga <sub>2</sub> (0); 3.729	Ga <sub>3</sub> (-)+Ga <sub>2</sub> (0); 4.315 Ga <sub>3</sub> (0)+Ga <sub>2</sub> (-); 4.748

<b>As<sub>4</sub></b>	As <sub>2</sub> (+)+As <sub>2</sub> (0); 2.186	As <sub>2</sub> (0)+As <sub>2</sub> (0); -0.259 As <sub>2</sub> (+)+As <sub>2</sub> (-); 0.846	As <sub>2</sub> (0)+As <sub>2</sub> (-); 2.040
<b>As<sub>5</sub></b>	As <sub>3</sub> (+)+As <sub>2</sub> (0); 1.546 As <sub>3</sub> (0)+As <sub>2</sub> (+); 3.766	As <sub>3</sub> (+)+As <sub>2</sub> (-); -0.325 As <sub>3</sub> (-)+As <sub>2</sub> (+); 0.498 As <sub>3</sub> (0)+As <sub>2</sub> (0); 0.790	As <sub>3</sub> (-)+As <sub>2</sub> (0); 2.095 As <sub>3</sub> (0)+As <sub>2</sub> (-); 3.441
<b>GaAs<sub>3</sub></b>	GaAs(0)+As <sub>2</sub> (+); 1.048 GaAs(+)+As <sub>2</sub> (0); 1.972	GaAs(-)+As <sub>2</sub> (+); 0.147 GaAs(0)+As <sub>2</sub> (0); 1.310 GaAs(+)+As <sub>2</sub> (-); 3.339	GaAs(-)+As <sub>2</sub> (0); 1.267 GaAs(0)+As <sub>2</sub> (-); 3.535
<b>Ga<sub>2</sub>As<sub>2</sub></b>	Ga <sub>2</sub> (0)+As <sub>2</sub> (+); 1.204 Ga <sub>2</sub> (+)+As <sub>2</sub> (0); 1.256 GaAs(0)+ GaAs(+); 3.526	Ga <sub>2</sub> (-)+As <sub>2</sub> (+); 2.021 Ga <sub>2</sub> (0)+As <sub>2</sub> (0); 2.350 Ga <sub>2</sub> (+)+As <sub>2</sub> (-); 3.507 GaAs(+)+ GaAs(-); 3.509 GaAs(0)+ GaAs(0); 3.748	Ga <sub>2</sub> (-)+As <sub>2</sub> (0); 2.693 GaAs(0)+ GaAs(-); 3.257 Ga <sub>2</sub> (0)+As <sub>2</sub> (-); 4.127
<b>Ga<sub>3</sub>As</b>	GaAs(0)+Ga <sub>2</sub> (+); 3.785 GaAs(+)+Ga <sub>2</sub> (0); 4.657	GaAs(-)+Ga <sub>2</sub> (+); 2.089 GaAs(0)+Ga <sub>2</sub> (0); 3.200 GaAs(+)+Ga <sub>2</sub> (-); 3.995	GaAs(-)+Ga <sub>2</sub> (0); 3.057 GaAs(0)+Ga <sub>2</sub> (-); 3.891
<b>GaAs<sub>4</sub></b>	GaAs <sub>2</sub> (+)+As <sub>2</sub> (0); -0.458 GaAs <sub>2</sub> (0)+As <sub>2</sub> (+); -0.609 GaAs(0)+As <sub>3</sub> (+); -0.984 GaAs(+)+As <sub>3</sub> (0); 2.166	GaAs <sub>2</sub> (0)+As <sub>2</sub> (0); -0.292 GaAs <sub>2</sub> (+)+As <sub>2</sub> (-); 0.964 GaAs(0)+As <sub>3</sub> (0); 1.559 GaAs(+)+As <sub>3</sub> (-); 2.242	GaAs <sub>2</sub> (-)+As <sub>2</sub> (0); 1.247 GaAs(-)+As <sub>3</sub> (0); 2.890 GaAs <sub>2</sub> (0)+As <sub>2</sub> (-); 4.307 GaAs(0)+As <sub>3</sub> (-); 5.812
<b>Ga<sub>2</sub>As<sub>3</sub></b>	Ga <sub>2</sub> (0)+As <sub>3</sub> (+); -1.178 Ga <sub>2</sub> As(0)+As <sub>2</sub> (+); -0.265 GaAs(0)+GaAs <sub>2</sub> (+); 0.840 Ga <sub>2</sub> As(+)+As <sub>2</sub> (0); 0.860 GaAs(+)+GaAs <sub>2</sub> (0); 1.613 Ga <sub>2</sub> (+)+As <sub>3</sub> (0); 1.194	Ga <sub>2</sub> As(-)+As <sub>2</sub> (+); -1.594 GaAs(-)+GaAs <sub>2</sub> (+); 0.015 Ga <sub>2</sub> As(0)+As <sub>2</sub> (0); 0.075 GaAs(0)+GaAs <sub>2</sub> (0); 1.029 GaAs(+)+GaAs <sub>2</sub> (-); 1.098 Ga <sub>2</sub> (+)+As <sub>3</sub> (-); 1.293 Ga <sub>2</sub> (0)+As <sub>3</sub> (0); 1.482 Ga <sub>2</sub> As(+)+As <sub>2</sub> (-); 1.605	Ga <sub>2</sub> As(-)+As <sub>2</sub> (0); 1.233 GaAs(-)+GaAs <sub>2</sub> (0); 2.693 GaAs(0)+GaAs <sub>2</sub> (-); 3.001 Ga <sub>2</sub> (-)+As <sub>3</sub> (0); 3.980 Ga <sub>2</sub> As(0)+As <sub>2</sub> (-); 4.007 Ga <sub>2</sub> (0)+As <sub>3</sub> (-); 4.068
<b>Ga<sub>3</sub>As<sub>2</sub></b>	Ga <sub>3</sub> (+)+As <sub>2</sub> (0); -0.698 Ga <sub>3</sub> (0)+As <sub>2</sub> (+); 0.534 GaAs <sub>2</sub> (0)+Ga <sub>2</sub> (+); 2.134 GaAs <sub>2</sub> (+)+Ga <sub>2</sub> (0); 2.233 GaAs(0)+Ga <sub>2</sub> As(+); 2.951 GaAs(+)+Ga <sub>2</sub> As(0); 3.450	Ga <sub>3</sub> (+)+As <sub>2</sub> (-); -0.085 Ga <sub>3</sub> (0)+As <sub>2</sub> (0); 0.042 Ga <sub>2</sub> As(-)+Ga <sub>2</sub> (+); 1.028 GaAs(+)+Ga <sub>2</sub> As (-); 1.289 GaAs(-)+Ga <sub>2</sub> As (+); 1.296 GaAs(0)+Ga <sub>2</sub> As (0); 2.034 Ga <sub>2</sub> As(0)+Ga <sub>2</sub> (0); 2.645 Ga <sub>2</sub> As(+)+Ga <sub>2</sub> (-); 2.741	Ga <sub>3</sub> (-)+As <sub>2</sub> (0); 0.838 GaAs(0)+Ga <sub>2</sub> As (-); 1.923 GaAs(-)+Ga <sub>2</sub> As (0); 2.429 Ga <sub>2</sub> As(-)+Ga <sub>2</sub> (0); 2.534 Ga <sub>3</sub> (0)+As <sub>2</sub> (-); 2.705 Ga <sub>2</sub> As(0)+Ga <sub>2</sub> (-); 3.874
<b>Ga<sub>4</sub>As</b>	GaAs <sub>2</sub> (0)+Ga <sub>2</sub> (+); 0.302 GaAs <sub>2</sub> (+)+Ga <sub>2</sub> (0); 0.401 GaAs(0)+Ga <sub>3</sub> (+); 1.479 GaAs(+)+Ga <sub>3</sub> (0); 1.635	GaAs <sub>2</sub> (+)+Ga <sub>2</sub> (-); 0.487 GaAs <sub>2</sub> (0)+Ga <sub>2</sub> (0); 0.665 GaAs(0)+Ga <sub>3</sub> (0); 1.126 GaAs(+)+Ga <sub>3</sub> (-); 1.288	GaAs <sub>2</sub> (-)+Ga <sub>2</sub> (0); 2.276 GaAs(-)+Ga <sub>3</sub> (0); 2.429 GaAs <sub>2</sub> (0)+Ga <sub>2</sub> (-); 2.802 GaAs(0)+Ga <sub>3</sub> (-); 2.830

Если в твердом растворе  $TiN_xH_y$  при условии  $y > x$  наблюдается распад твердого раствора на две гексагональные фазы, то на примере твердого раствора  $TiN_{0,32}D_{0,37}$  показано, что область гомогенности упорядоченного гексагонального твердого раствора в системе Ti-N-D гораздо шире, чем в системе Ti-N-H.

Естественно предположить, вышеперечисленные отличия в структурных особенностях и фазовых соотношениях твердых растворов систем Ti-N-D и Ti-N-H обусловлены изотопическими особенностями атомов водорода и дейтерия.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРЕДНЕКВАДРАТИЧНЫХ СМЕЩЕНИЙ АТОМОВ В МЕТАЛЛАХ Ni И Al, И В СОЕДИНЕНИИ NiAl МЕТОДОМ ДИФРАКЦИИ НЕЙТРОНОВ

Орлова Т.

*Ташкентский Государственный Педагогический  
Университет им. Низами, Ташкент*

Одними из важных термодинамических величин, характеризующих тугоплавкие сплавы, являются среднеквадратичные смещения атомов  $\sqrt{u^2}$ . Это вызвано тем что, такие свойства как твердость, хрупкость и тугоплавкость, особенно при высоких температурах, в основном определяются, прочностью межатомных связей в кристалле. Мерой этой прочности может служить характеристическая температура Дебая, так как величина силы межатомной связи  $f$  пропорциональна квадрату температуры Дебая.

О прочности межатомной связи можно судить по величине среднеквадратичных смещений атомов, вызванных тепловыми колебаниями, поскольку они однозначно связаны определенным соотношением с характеристической температурой. Знание об этих величинах необходимо для прогнозирования и регулирования прочностных и других физических свойств кристаллов и являются актуальной задачей физики твердого тела.

Значение  $\sqrt{u^2}$  может быть определено различными методами – из измерений теплоемкости, электрического сопротивления, модуля упругости, молекулярных спектров, рентгенографических данных. Однако, данные по  $\sqrt{u^2}$ , полученные различными методами плохо согласуются между собой. Среди этих методик сравнительно прецизионной является рентгенографическая методика, так как по этой методике  $\sqrt{u^2}$  определяется непосредственно из эксперимента без применения сложных расчетов и приближений.