

# КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ИОНИЗАЦИОННО-СТИМУЛИРОВАННОЙ ФРАГМЕНТАЦИИ АТОМНЫХ КЛАСТЕРОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

П.Л.Терещук\*, Н.Т.Сулаймонов

*Институт Ядерной Физики АН РУ, Ташкент*

*\*Кафедра Ядерной Физики НУУ, Ташкент*

В настоящее время представляют большой интерес атомные кластеры – искусственные образования, получаемые из массивных образцов веществ. Интерес к этим кластерам возникает благодаря их технологической важности, например, в катализе, фотографических пленках, магнитных лентах и т.д. За последние 10-15 лет было обнаружено, что эти кластеры могут иметь совершенные другие структуры, чем их массивные аналоги, и проявлять качественно новые свойства, отсутствующие в этих аналогах, что открывает новые, гораздо более широкие области их применения.

Поэтому получение и исследование атомных кластеров является одним из самых интересных и важных направлений современной физики конденсированного состояния и материаловедения. Следует отметить, что в зависимости от способа и условий получения могут быть образованы всевозможные кластеры, как правило, с определенным запасом внутренней энергии из-за неизбежного возбуждения при этом электронных или атомных степеней свободы. Перераспределение избытка энергии кластера между атомными степенями свободы впоследствии может облегчить распад первичных кластеров на фрагменты меньших размеров. Таким образом, процессы образования и фрагментации кластеров довольно сложный и еще не достаточно изучены как в экспериментальном, так и в теоретическом отношении, особенно, что касается влияния на эти процессы возбуждения и ионизации системы.

Хорошо известно, что облучение полупроводниковых материалов фотонами и электронами может индуцировать электронные переходы в состояния, которые являются отталкивательными, и последующая конверсия потенциальной энергии атомов в кинетическую может привести к смещению атомов. Такие процессы, индуцированные возбуждением электронной подсистемы или ионизацией, эффективно реализуются в поверхностных

слоях материалов. Возбуждение и ионизации может привести к еще более существенным эффектам в небольших кластерах атомов, так как при этом избыток энергии, появляющийся в системе, распределяется, в отличие от массивного образца, по небольшому количеству атомов.

В данной работе впервые методом компьютерного моделирования исследован процесс фрагментации небольших стехиометрических кластеров арсенида галлия, стимулированной их многократной ионизацией. Такая ионизация может быть вызвана, например, под воздействием лазерного облучения или при поглощении атомом кластера рентгеновского кванта с энергией, достаточной для ионизации одной из внутренних оболочек, например К-оболочки. В последнем случае, каскад безизлучательных Оже-переходов [1] приводит к многократной ионизации атома.

В случае твердого тела дырки во внутренних оболочках атомов заполняются, в конечном счете, за счет электронов из энергетических зон, поэтому время жизни многократного зарядового состояния является ограничивающим фактором для реализации механизма деструкции, обусловленного отдельным многозарядным ионом. В настоящей работе мы интересуемся случаем, когда дырки, первоначально образованные в одном из атомов кластера, всплывают на самые внешние энергетические уровни системы, т.е. положительный заряд будет принадлежать ко всему кластеру, а не отдельному атому. Мы полагаем, что это оказывает более существенное влияние на стабильность кластеров, чем один многозарядный ион, так как при этом энергия связи всего кластера существенно уменьшится.

Для компьютерного моделирования процесса фрагментации кластеров был использован, разработанный нами, метод молекулярно-динамического моделирования [2], основанный на самосогласованном методе сильной связи [3] для расчета электронной структуры и полной энергии многоатомных систем и новых уравнениях численного интегрирования [4] уравнений движения Ньютона.

В результате компьютерного моделирования был выявлен ряд особенностей фрагментации полупроводниковых кластеров, вызванных их ионизацией. В частности, показано, что многократная ионизация кластера действительно имеет более существенный эффект в деструкции кластера, чем отдельный ион с такой же зарядностью.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Э.С.Парилис. Эффект Оже //Ташкент, Фан, 1969. 212 с.
2. Z.M.Khakimov, F.T.Umarova, N.T.Sulaymonov, P.L.Tereshuk. In: II Eurasian Conference on "Nuclear science and its application". Abstracts (Almaty, Republic of Kazakhstan, September 16-19, 2002), P.290-291.
3. Z.M. Khakimov. // Comput. Mater. Sci. – 1994. – V.3(1). – P.95-108.
4. Z.M. Khakimov. // Comput. Phys. Comm. –2002. – V. 147. – P.731-734.

## НЕЙТРОНОГРАФИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ СТРУКТУРЫ ТВ-СО-О

**Кутлимуратов С.Р. Ташметов М.Ю.**

*Институт Ядерной Физики АН РУ, Ташкент*

Методом нейтронной нейтронографии на установке HRPT (PSI Швейцария) проведены исследования структуры соединений Ть-Со-О при температуре от 300К до 10К образец был приготовлен методом твердого вакуумного спекания. Методом Ритвольда была выполнена обработка полученных экспериментальных нейтронографических данных.

Установлено, что после синтеза (при температуре 1300 К) и обжига при 850 К и образец состоит из нескольких фаз.

## ФОТОПРОВОДИМОСТЬ ДЫРОЧНОГО КРЕМНИЯ, ЛЕГИРОВАННОГО ВАНАДИЕМ

**Мамадалимов А.Т.\*, Муминов Р.А.\*\*, Усмонов Т.А.\*,  
Шоюсупов Ш.А.\***

*\*Национальный Университет Узбекистана, Ташкент*

*\*\*Физико Технический Институт АН РУ, Ташкент*

Изучение фотопроводимости (ФП) кремния, легированного различными примесями, создающими глубокие уровни, представляет интерес для разработки фотоприёмников для средней инфракрасной области спектра. К настоящему времени изучено большое количество примесей с глубокими