

Рис.1. Рентгенодозиметрические характеристики кристаллов TlInSe_2 в зависимости от жесткости излучения при значениях ускоряющего потенциала: 1 - 25 кВ, 2 - 30 кВ, 3 - 35 кВ, 4 - 40 кВ, 5 - 45 кВ, 6 - 50 кВ при 300 К

существенно увеличить рентгеновскую чувствительность кристаллов TlInSe_2 . При этом наилучшие результаты достигаются в образцах, легированных примесями Ag.

Как было показано выше, при малых дозах облучения нейтронами и электронами структура кристаллов упорядочивается и рассеяние носителей на структурных дефектах уменьшается. В результате, как и фоточувствительность, рентгеновская чувствительность увеличивается.

Увеличение K в образцах, легированных примесями I группы, обусловлен тем, что эти примеси, являясь акцепторами, увеличивают концентрацию дырок в кристаллах p - TlInSe_2 при облучении рентгеновскими лучами.

Коэффициент рентгенопроводимости K_σ во всех исследованных образцах уменьшаются как по мере возрастания мощности дозы ($E=0,75 \div 78,05$ Р/мин), так и с увеличением жесткости (энергии) ($V=25 \div 50$ кВ) рентгеновского излучения. Наиболее вероятной причиной этого явления может являться то, что с увеличением жесткости излучения уменьшается коэффициент поглощения, т.е. уменьшается доля излучения, создающего при поглощении фото-электроны.

Установлено, что введение примеси Cu на порядок, а примеси Ag на два порядка увеличивает рентгеночувствительность кристаллов TlInSe_2 .

Литература

- 1.Hahn H. und Wellman B. Uberternare Chalkogenide des Thalliums mit Gallium und Indium. // J.Natur Wissen shaften. 1967. v. 54. № 1. P. 42.
- 2.Guseinov G.D., Mustafaeva S.N., Iskenderov G.I., Guseinova R.G. X - ray conductivity of lithium intercolated TlInSe_2 single crystals. // Inorganic Materials, 1989. v. 25. № 6. P. 877-878.
- 3.Мустафаева С.Н., Гасанов Н.З., Керимова Э.М. Влияние интеркалирования на рентгенодозиметрические характеристики монокристаллов TlMSe_2 (M – In, Ga). // 3-я международная конференция Ядерная и Радиационная физики: Тез. докл. Межд. народ. конф. 4 – 7 июня 2001. - Алматы, 2001. с. 227-228.
- 4.Мамедов Ф.И., Керимова Э.М. Рекомбинационные процессы в монокристаллах типа $A^I B^{III} C_2^{VI}$ под действием света, гамма- и рентген облучения. // 3-я международная конференция Ядерная и Радиационная физики: Тез. докл. Межд. народ. конф. 4 – 7 июня 2001. - Алматы, 2001. с. 349-350.
- 5.Nadjafov A.I.,Madatov R.S. Rentgenoconductivity in crystals of α and β TlInS_2 . //II Eurasian Conference on nuclear science and ist application.Abstracts, Almaty – 2002, p. 284.
- 6.Sultanov G.J., Aldianov M.A., Kerimova E.M., Abdullaeva S.G., Gamma – NGR investigations in TlFeS_2 crystal. // 3rd International Conference Nuclear and Radiation Physics.: 4-7 june 2001. - Almaty, Kazakstan, – 2001, p. 202-203.
7. Поройков И.В. Рентгенометрия. - М. - Л.: Гос. Изд-во техн.-теор. Литературы. 1960. – 334 с.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ КВАЗИОДНОМЕРНЫХ НАНОКЛАСТЕРОВ КРЕМНИЯ

Ф.Т. Умарова, П.Л. Терещук, А.Б. Нормуродов

Институт ядерной физики АН РУз, 700132 Улугбек, Ташкент, Узбекистан, umarova_inp@mail.ru

Квазиодномерные кластеры кремния привлекают внимание исследователей в связи с возможностью их применения в светоизлучающих приборах с низким потреблением энергии. В ряде экспериментальных работ [1-4] исследованы электронные и оптические свойства синтезированных нанопроволок кремния, однако определить их структуру пока не удается.

В данной работе мы представляем результаты моделирования роста квазиодномерных полых кластеров кремния и сравнительное исследование стабильности двух типов полых кластеров. Расчеты проводились новым полуэмпирическим методом сильной связи (НТМС), для оптимизации кластеров использован молекулярно-динамический метод. Методы детально описаны в [5].

Структура исходных полых кластеров Si_{12} представляет собой два кремниевых шестиугольника, расположенных параллельно друг над другом, образуя правильную шестиугольную призму (кластеры типа *a*). Стабильность такого кластера показана в [6]. Исследован также изомер, в котором каждый слой атомов развернут друг относительно друга таким образом, что атомы боковых граней образуют правильные равносторонние треугольники (кластеры типа *b*). Длины Si–Si связей задавались одинаковыми и равными 2.32 Å, что соответствовало средней длине связи для объемного кремния. Рост кластеров моделировали добавлением шестиатомного слоя к предыдущему кластеру. На рис. 1 и 2 показаны оптимизированные геометрии исследованных кластеров.

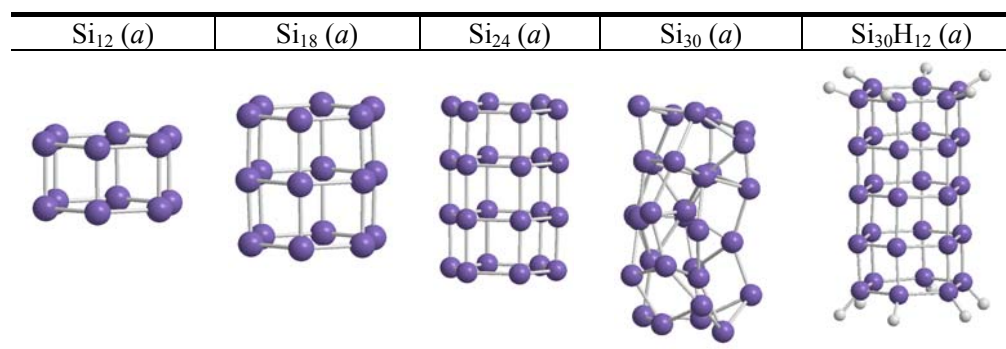


Рис. 1. Структура гексагональных полых кластеров типа *a*.

Как видно из рис. 1, кластеры типа *a* после оптимизации сохраняют полую структуру вплоть до 24-атомного размера включительно, однако длины связей уменьшаются, и кластеры приобретают более компактную форму для сохранения устойчивости. С ростом размера кластера наблюдается разброс в значениях длин связей и кластер Si_{30} искажается и теряет полую структуру. Следует отметить, что особенностью кластеров типа *a* является наличие трехкоординированных атомов в торцевых слоях. При их пассивации водородом кластеры вновь восстанавливают полую структуру.

Кластеры типа *b* показаны на рис. 2. Все атомы четырехкоординированы. После оптимизации объем кластеров увеличивается, длины связей в целом больше по сравнению с кластерами типа *a*. Кластер Si_{12} сохраняет свою полую структуру, однако длины связей между атомами в основании меньше, так что боковые грани состоят из равнобедренных треугольников. Структура кластера Si_{18} приобретает фуллереноподобную форму. Этот кластер можно представить как две гексагональные антипризмы, общее основание которых имеет больший радиус, нежели крайние атомные слои. Следующий по размеру кластер Si_{24} после оптимизации полностью теряет полую структуру. Искаженная структура кластера Si_{24} стабилизируется двумя дополнительными атомами кремния, расположенными по оси кластера, в результате чего получается хорошо известная фуллереноподобная структура Si_{26} .

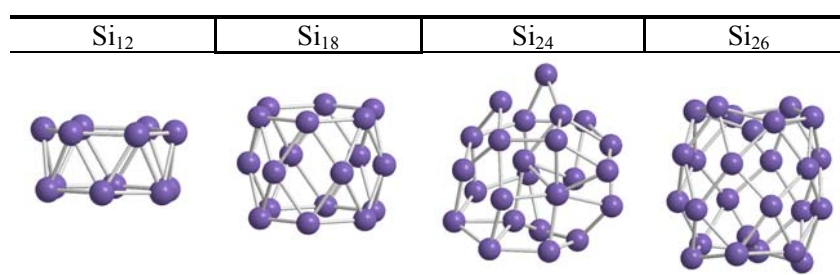


Рис. 2. Структура оптимизированных кластеров типа *b*.

В таблице приведены оптимизированные характеристики всех исследованных кластеров. Как видно, общая тенденция возрастания энергии связи на атом с увеличением числа атомов наблюдается для кластеров обоих типов, однако кластеры типа *b* энергетически несколько более устойчивы. По-видимому, это связано с присутствием оборванных связей в кластерах типа *a*. Однако все исследован-

ные структуры термодинамически более стабильны, нежели алмазоподобные структуры такого же диаметра. Энергетическая щель (разность ВЗМО-НСМО) исследованных кластеров с ростом их размера меняется нерегулярно, полученные значения лежат в пределах 0.155–0.515 эВ.

Таблица 1. Характеристики оптимизированных кластеров.

Кластер	$R_{гориз}, \text{Å}$	$R_{верт}, \text{Å}$	Энергия связи на атом, эВ	Энергетическая щель, эВ
Si ₁₂ (a)	2.2825	2.2655	3.588	0.4096
Si ₁₈ (a)	2.2685	2.2835	3.813	0.2024
Si ₂₄ (a)	2.2665	2.2905	4.013	0.515
	2.3225	2.3305		
Si ₁₂ (б)	2.3695	2.3985	3.634	0.1549
Si ₁₈ (б)	2.3414	2.3975	3.816	0.4948
	2.633			

Таким образом, исследован квазиодномерный рост небольших полых кластеров кремния с гексагональным основанием. Показана стабильность одиночных полых кластеров с размерами от 12 до 24 атомов. Кластеры Si₂₄(a) и Si₂₆(б) могут служить строительными блоками синтезированных нанопроволок кремния.

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Papadimitriou and A.G. Nassiopoulou, J. Appl. Phys. **84**, 1059 (1998).
2. D.P. Yu, Z.G. Bai, and S.Q. Geng, Phys. Rev. B **59**, R2 498 (1999).
3. N.T. Bagraev, E.T. Chaikina, and A.M. Malyarenko, Solid-State Electron. **42**, 1199 (1998).
4. B. Li, D. Yu, and S.-L. Zhang, Phys. Rev. B **59**, 1645 (1999).
5. Z.M. Khakimov, P.L. Tereshchuk, N.T. Sulaymanov, F.T. Umarova, M.T. Swihart, Phys. Rev. B **72**, 115335 (2005).
6. А.А. Кузубов, А.В. Черкашин, В.Г. Кляшторный, М.А. Втюрин, Вестник КрасГУ, Естественные науки №2, 84 (2006).

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЛЬТАМПЕРНОЙ ХАРАКТЕРИСТИКИ pSi-n(SiGe)_{1-x}(ZnSe)_x СТРУКТУР

Усмонов Ш.Н., Амонов К.А. Курмантаев А.Н.

Физико-технический институт АН РУз, г.Ташкент. kvant.ph@mail.ru

В данной работе приведены предварительные результаты исследования вольтамперных характеристик (ВАХ) pSi-n(SiGe)_{1-x}(ZnSe)_x структур. Структуры изготавливались выращиванием твердого раствора (SiGe)_{1-x}(ZnSe)_x n- типа проводимости с толщиной 20 мкм на Si подложках с ориентацией (111), удельным сопротивлением 10 Ом·см и толщиной ~ 350 мкм p-типа проводимости методом жидкофазной эпитаксии из ограниченного объема оловянного раствора-расплава (Si-Ge-Zn-Se-Sn) по технологии, описанной в работе [1]. Площадь образца составляла 0.38 см². Для снятия ВАХ к образцам создавались сплошные омические контакты из серебра, как со стороны подложки, так и со стороны эпитаксиальной пленки методом вакуумного напыления, и тем самым создавались структуры типа R_{ом}-p-n-R_{ом} с базовой областью из твердого раствора n(SiGe)_{1-x}(ZnSe)_x.

Темновые ВАХ снимались при комнатной температуре. На рис.1 представлена типичная ВАХ в прямом и обратном направлениях (а) и ее прямая ветвь в логарифмических масштабах. Из рисунка видно, что ВАХ исследованных структур имеет выпрямляющие свойства. Анализ прямой ветви ВАХ показывает, что зависимость тока от напряжения можно экстраполировать по степенной зависимостью типа $I \sim V^\alpha$ с разными значениями показателя степени α . Начальный участок от нуля до 0,35 В представляет собой омический участок с показателем $\alpha=1$, т.е. имеется зависимость - $I \sim V$. С ростом приложенного напряжения значение показателя степени α изменяется. За омическим участком в диапазоне от 0.4 до 0.9 В наблюдается более сильная чем омическая зависимость $I(V)$, но слабее, чем