



Рис. 1. Особенности кривой $\lambda(T)$ образца №2.

Далее было изучено влияние реакторного облучения различными флюенсами Φ на теплопроводность сплава. Например, при росте Φ до 10^{18} см^{-2} обнаружено существенное изменение графика $\lambda(T)$, некоторый излом около 100°C и уменьшение параметра. Последующее пребывание пластин в каналах реактора до сравнительно большой дозы (10^{19} см^{-2}) привело к дальнейшему преобразованию кривой, ее снижению и наличию экстремума, который сместился в сторону повышенных температур. Оценен радиационный эффект изменения теплопроводности материала для функции $\lambda(\Phi)$, который зависит от Φ и составляет значительную величину. Обсуждаются вероятные причины обнаруженных радиационных эффектов модифицирования теплопроводности конструкционного сплава САВ-1 после длительной его обработки в каналах ядерного реактора и возможный механизм рассмотренного в работе явления переноса тепла в нем.

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ НАНОЧАСТИЦ Si_mH_n

Н.Т. Сулайманов

Институт Ядерной Физики АН РУ, e-mail: nts_05@mail.ru

ВВЕДЕНИЕ

Образование и взаимодействие наноразмерных частиц Si_mH_n в разных экспериментальных условиях имеет целый ряд особенностей, которые часто приводят к проявлению новых, не наблюдаемых в объемном кремнии свойствам [1]. Экспериментальные методы генерирования таких частиц хорошо известны [2-4]. При отрыве от мишени и во время пролета в газовой среде или в вакууме, а так же при осаждении на подложку, наноразмерные частицы находятся в метастабильных состояниях, и большая часть избытка энергии расходуется на взаимодействия между частицами. С целью выяснения структурных и энергетических параметров кластеров, образующихся в результате взаимодействий малых гидрогенизированных кластеров кремния (Si_mH_n), выполнено моделирование процесса при условиях, соответствующих условиям газофазной среды около мишени в экспериментах по генерированию кластеров [1-4]. Для расчетов равновесных структур кластеров, соответствующих глобальным минимумам энергии связи применили нетрадиционный метод сильной связи [5] в комбинации с молекулярной динамикой, где для расчета сил используется алгоритм предложенный в [7].

МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРУКТУР И СВОЙСТВ КЛАСТЕРОВ

Используемый в данной работе НМСС [5] основан на следующем выражении для полной энергии

$$E_{tot} = E_{rep} + E_{bond} + \Delta E. \quad (1)$$

Здесь E_{bond} представляет собой чистую электронную составляющую энергии химической связи. ΔE –

сумма изменений полных энергий индивидуальных атомов по отношению к изолированным атомам, которые могут быть параметризованы модифицированной формулой Слейтера-Зернера [5] без явного обращения к E_{ee}^{intra} и с использованием точных и многочисленных спектроскопических данных по атомам и ионам. Член отталкивания имеет достаточно простой физический смысл

$$E_{rep} = E_{nn} - E_{ee}^{inter} + E_{bond} \cong E_{nn} + E_{ne}^{inter}, \quad (2)$$

так как больше не включает сложную составляющую E_{ee}^{inter} ; она сокращается в разности $E_{bond} - E_{ee}^{inter}$ [5], оставляя простую составляющую E_{ne}^{inter} , энергию притяжения электронов, локализованных вокруг одних ядер, к другим ядрам (двухцентровые кинетические энергии электронов не показаны в (2); знак приближенного равенства отражает это обстоятельство).

Выражение для полной энергии может быть записано и в следующем виде

$$E_{tot} = \tilde{E}_{rep} + 2E_{bond} + \Delta E, \quad (1a)$$

которое используется в варианте МСС, основанном на упрощенной оценке матрицы порядков связей [6], однако опять же без надлежащего внимания к последнему члену; применяется приближение локального зарядового нейтралитета для повышения эффективности расчетов. Сравнивая уравнения (1a) и (1), можно видеть, что член E_{rep} является более короткодействующим, чем \tilde{E}_{rep} : $E_{rep} \approx \tilde{E}_{rep} / 2$ на расстояниях порядка характерных длин связей и $E_{rep} \ll \tilde{E}_{rep}$ на больших расстояниях (это также связано с видом отталкивательного члена в нашем случае) при условии, что E_{bond} и ΔE имеют одинаковые значения в обоих уравнениях. Вследствие этого и из-за простого физического смысла, E_{rep} можно более надежно представить суммой функций парных взаимодействий, чем \tilde{E}_{rep} , что важно как для эффективности, так и для точности расчетов. Отсюда также можно заключить, что более протяженный характер \tilde{E}_{rep} , по-видимому, является основной причиной систематической переоценки длин связей в кремниевых кластерах традиционными МСС. При выполнении итеративных самосогласованных расчетов НМСС для ускорения получения результата применяются алгоритмы динамического демпфирования и сдвига уровней. В каждом временном шаге (в наших расчетах $\sim 10^{-15}$ с) для достижения самосогласованного результата оказались достаточны 2-5 итераций. Далее результат обрабатывается по алгоритму молекулярной динамики, предложенной в [7]. При достижении глобального энергетического минимума, расчеты завершаются и выводится конечный результат.

РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ КЛАСТЕРОВ Si_mH_n

Мы в рамках компьютерного моделирования методом НМСС в комбинации методом молекулярной динамики выполнили расчеты структур и энергий равновесных состояний, которые, как мы предполагаем, соответствуют глобальным минимумам полных энергий связи кластеров SiH, SiH₂, SiH₃, SiH₄. Затем, в рамках молекулярной динамики, используя алгоритм T-12, предложенной в [7] исследовали динамику взаимодействия этих кластеров в нейтральном и заряженных состояниях. По результатам наших исследований можно заключить, что

1. При взаимодействии атомов Si и H как в нейтральном, так и в заряженных состояниях, образование SiH кластера происходит при достижении расстояния $R_{Si-H} \approx 1.51 \text{ \AA}$.
2. При взаимодействии атома Si и двух, трех и четырех атомов H (или молекулой H₂) в нейтральном состоянии образуется SiH₂, SiH₃, SiH₄, но если какой-либо из атомов, участвующих во взаимодействии, заряжен – один атом водорода связывается с Si, образуя SiH⁺ или SiH⁻ радикал, а другие – отлетают в сторону.
3. При взаимодействии в нейтральном состоянии двух SiH образуется Si₂H₂, в положительно заряженном состоянии образуется Si₂H кластер, второй атом водорода отлетает.
4. Образование устойчивых структур Si₅H_n (n=4,5) и Si₆H_n (n=6,11), по результатам наших расчетов возможно для нейтральных и положительно заряженных состояний. В случае взаимодействия шести SiH кластеров или SiH₂ кластеров образуются устойчивые кольцеобразные структуры.

5. По результатам наших расчетов можно заключить, что в анионах лишний электрон «сядет» на анти-связывающую орбиталь, в результате чего электрон находящийся на связывающей орбитале приняв часть энергии от этого электрона возбуждается и устойчивость связи резко снижается. В следствии этого, также снижаются устойчивости соседних связей и вместо образования нового кластера Si_mH_n ($m=3,4,5$, $n=3,4,5,8,10,12$) часть атомов H покидают Si-H систему и образуют H_2 молекулу, остальные осколки образуют неустойчивые низко-симметричные частицы.

Кремне этого, указываем на следующие обстоятельства: а) в случае дианионов (SiH^{2-}), вновь наблюдается стабилизация симметричных структур. б) образование устойчивой кольцеобразной структуры в рамках МД-оптимизации как в нейтральном, так и заряженных состояниях для Si_6H_6 указывает на то, что стабилизация электронной структуры происходит за счет перехода электронов с антисвязывающих орбиталей на связывающие.

Цитированная литература

1. В.А. Батулин, А.Ю. Карпенко. ВОПРОСЫ АТОМНОЙ НАУКИ И ТЕХНИКИ. 2009. №6. Серия: Вакуум, чистые материалы, сверхпроводники (18), С. 175-180.
2. М. Д. Ефремов, С. А. Аржанникова, В. А. Володин, Г. Н. Камаев, Д. В. Марин. Вестник НГУ. Серия: Физика. 2007. Том 2, Выпуск 2. С. 51-60.
3. N. G. Semaltianos, S. Logothetidis, W. Perrie, S. Romani, R. J. Potter, S. P. Edwardson, P. French, M. Sharp, G. Dearden, K. G. Watkins. //J Nanopart Res..Published online. 10 Apr. 2009. 8 pages.
4. Tai-Cheng Tsai, Li-Zhen Yu and Ching-Ting Lee. //Nanotechnology. 2007. 18. P.275707 (5pp).
5. Z. M. Khakimov. //Comput. Mater. Sci. 1994. V.3. P. 95-108.
6. A. P. Horsfield, A. M. Bratkovsky, M.Fearn, D. G. Pettifor, M. Aoki. //Phys. Rev. B 1996. V.53, № 19, P. 12694-12712.
7. Z.M. Khakimov. //Comput. Phys. Comm. 2002. V. 147. P. 731-734.

ТЕНЗОРЕЗИСТИВНЫЕ ПЛЕНКИ $(Bi_{0,3}Sb_{0,7})_2Te_3$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ЦИКЛИЧЕСКИХ ЗНАКОПЕРЕМЕННЫХ ДЕФОРМАЦИЙ

Сулаймонов Х.М., Султонов Ш.Д., Юлдашев Н.Х., Юлдашев Х.Т.
Ферганский политехнический институт, 712022 г. Фергана, Ферганская 86
Факс: 222-27-81, e-mail: uzferfizika@mail.ru

Исследовались поликристаллические пленки $(Bi_{0,3}Sb_{0,7})_2Te_3$ толщиной $d=3 \cdot 10^{-3}$ мм и площадью 5×20 мм², которые получались на подложках из полиимида МП-1 с температурой $T = 250-300$ °С методом вакуумной конденсации молекулярных пучков из газообразной фазы [1]. Для снятия деформационных характеристик (ДХ) пленки наклеивались на балку равного сопротивления из титанового сплава. Деформирование пленок проводилось изгибом балки. При этом значение относительной деформации рассчитывалось по величине прогиба консольно-закрепленной балки [2] и не превосходило $\varepsilon = \pm 3 \cdot 10^{-3}$ отн.ед. Влияние количества циклов N и амплитуды ε знакопеременной механической деформации на тензометрические характеристики пленок $(Bi_{0,3}Sb_{0,7})_2Te_3$ изучалось по изменению сопротивления R и коэффициента тензочувствительности (КТЧ) K , определяемой формулой $K = \Delta R / (R_0 \cdot \varepsilon)$, где $\varepsilon = \Delta l / l_0$ и $\Delta l = l(\varepsilon) - l_0$ - относительная и абсолютная деформации, $\Delta R = R(\varepsilon) - R_0$, R_0 - электрическое сопротивление образца при $\varepsilon = 0$. Очевидно, что представляет наибольший интерес изучение ДХ пленок в предельно малом и большом количествах N циклических знакопеременных деформаций (ЦЗПД).

Сначала обсудим результаты измерения абсолютного $\Delta R = R(\varepsilon) - R_0$ и относительного $\Delta R(\varepsilon) / R_0$ изменений сопротивления свежеприготовленных пленочных образцов при малом числе циклов нагружений в зависимости от последнего не только по значению, но и по знаку. На первом этапе рассмотрим область деформаций растяжения от $\varepsilon = 0$ до $\varepsilon = \varepsilon_0$, а во втором этапе получим