

**В сборник вошли результаты работ, выполнявшихся в 1996 году в ВУЗах республики в рамках Межвузовской программы фундаментальных исследований "Физические основы получения, диагностики, функционирования и применения низкоразмерных элементов и систем". Данные работы посвящены разработке принципов технологии получения и диагностики материалов с низкоразмерным структурированием, изучению свойств низкоразмерных элементов, получению и исследованию свойств низкоразмерных структур, а также теории статических и динамических низкоразмерных систем.**

**Сборник может быть полезен также аспирантам и студентам физических, химических и технических факультетов университетов и других ВУЗов.**

Подписано к печати 16.11.97. Формат 60x84/16. Бумага офс. № 1.  
Печать офсетная. Усл. печ. л. 5,2. Тираж 105 экз. Заказ № 2961.  
Белгосуниверситет. 220050. Минск, пр. Ф. Скорины, 4.

*Отпечатано на предприятии «Технопринт».  
Лицензия ЛП №250.  
220027, Минск, пр. Ф. Скорины, 65, корп. 14.*

## КОНЦЕПЦИЯ

### Межвузовской программы фундаментальных исследований (МПФИ) "Физические основы получения, диагностики, функционирования и применения низкоразмерных элементов и систем"

#### 1. ЦЕЛИ И ФУНКЦИИ МПФИ

Одним из условий устойчивого экономического и социального развития любого государства является поддержание в нем высокого научно-технического потенциала. По благоприятному стечению обстоятельств в Республике Беларусь указанный потенциал находился I, пока еще, находится на весьма высоком уровне. И в частности, в республике получил развитие такой наукоемкий вид промышленности как электронно-оптическая, которая, без преувеличения, составляет одну из основ высокотехнологической части научно-технического потенциала республики. Эти отрасли промышленного производства обеспечены необходимыми кадрами (как научными, так и инженерно-техническими) и современным технологическим оборудованием. Республиканские предприятия электронной промышленности и соответствующие отраслевые НИИ, специализирующиеся в современной микро- и оптоэлектронике, к 1990 году завершили освоение элементов интегральных структур в диапазоне размеров  $10^6$  метра и интенсивно осваивают субмикронный диапазон (порядка  $10^7$  метра). На ведущих предприятиях Беларуси получены экспериментальные образцы и началось промышленное производство СБИС с субмикронными размерами элементов. Поэтому естественно **полагать**, что в течение нескольких ближайших десятилетий в Беларуси (как и во всех промышленно развитых странах мира) максимальное развитие должна получить **нанотехнология**, осваивающая диапазон размеров структурирования электронно-оптических элементов  $10^8$ - $10^9$  метра. Соответствующие научно-технические прогнозы предполагают, что в области создания электронно-оптических компонент к середине 21-го века нанотехнология станет господствующей, объединяясь в ее физическом, химическом и биологическом аспектах.

Однако для дальнейшего прогресса наукоемких отраслей электроннооптической промышленности в направлении нанотехнологии требуется разработка и решение целого комплекса научных и научно-технических задач. К их числу относятся, прежде всего, следующие:

1. Необходимо превысить ныне достигнутый технологический уровень создания низкоразмерных элементов и структур. Это возможно лишь за счет скорейшего выхода на размеры структурирования в диапазоне  $10^8$ - $10^7$  метра (см. схему шкалы размеров) и быстрого преодоления его. Данная научно-техническая проблема должна быть решена до конца

текущего тысячелетия, если Беларусь хочет сохранить принятую тенденцию развития в ней наукоемких малосырьевых производств.

2. Необходимо создать новую теоретическую базу описания электронно-атомных процессов, протекающих в таких **низкоразмерных системах (НРС)**. Дело в том, что физической базой описания электронных процессов в современной электронике, имеющей дело с размерами элементов не ниже микронных, является зонная теория твердых тел. Однако при размерах элементов, попадающих в диапазон НРС ( $10^8$ - $10^7$ ) метра данная теория уже не может быть применена в принципе. В то же время, квантовая теория изолированных атомов, являющаяся базой для описания элементов нанометрового диапазона ( $10^{10}$ - $10^9$  метра), еще не может быть использована для адекватного описания электронных процессов в НРС.

3. Необходима разработка технологии получения и методов диагностики новых материалов, в низкоразмерном структурировании которых уже заложены свойства, характерные для НРС. Речь идет, прежде всего, о таких материалах как фуллерены, проводящие полимеры и биополимеры, молекулярные и иные ансамбли низкоразмерных частиц, атомные кластеры, квази- и нанокристаллические системы и др. Кроме того, большой интерес представляют и традиционные материалы современной электроники, внутри которых различными внешними воздействиями могут быть созданы одиночные низкоразмерные дефекты либо их ансамбли (треки высокоэнергетичных ионов, дислокационные сетки и стенки, ассоциаты точечных дефектов решетки и т.д.).

**Целью данной программы является:** создание теоретической базы описания электронно-атомных процессов в НРС; получение фундаментальных закономерностей, определяющих физико-химические особенности формирования, электронные, оптические и другие свойства низкоразмерных элементов и систем для создания на их основе нового поколения высокоинтегрированных сверхбыстродействующих систем обработки, передачи и хранения информации; разработка принципов технологии получения и методов диагностики новых материалов с низкоразмерным структурированием; разработка учебно-научной базы для подготовки специалистов в области физико-химии и технологии НРС.

Необходимый научный задел по указанным направлениям сделан учеными и преподавателями ВУЗов и АН Беларуси при реализации межвузовской программы "Интеллектуальные материалы", проектов Фонда фундаментальных исследований, подпрограммы "Элементная база" программы "Информатика", ряда внутривузовских программ. Их результаты опубликованы в престижных международных журналах и представлялись на многочисленных международных конференциях. Достижения белорусских преподавателей и ученых высоко оценены мировым научным сообществом. Они стали основой для взаимовыгодной научной кооперации со многими зарубежными странами через совместные международные проекты, в том числе в рамках программ INTAS, NATO, фонда Сороса и др.

На первом этапе (1996-2000 годы) научные исследования и технологические разработки целесообразно сосредоточить на следующих направлениях:

- разработка фундаментальных принципов теории низкоразмерных систем на основе концепции конечной пространственно-временной локализации зарядов;
- разработка физико-химических принципов единого технологического комплекса по получению новых классов низкоразмерных материалов и структур;
- разработка научных основ перехода электронно-оптических отраслей промышленности Республики Беларусь на новую элементную базу и новые принципы обработки электронно-оптической информации на основе НРС;

В основу формирования МПФИ положен комплексно-целевой подход, при котором предусматривается:

- определение основных целей и приоритетов в развитии теоретической базы описания и создания НРС;
- определение основных задач в создании новых материалов и сред, в которых могут быть реализованы низкоразмерные эффекты;
- определение основных направлений развития технологии создания НРС;
- определение основных направлений развития метрологии параметров НРС.

Реализация МПФИ должна обеспечить к 2000 году создание основ теории КРС; научные основы технологии получения и диагностики нового класса материалов с низкоразмерным структурированием; методов получения различных видов композитных наноразмерных структур, в том числе типа "биоструктура-полупроводник"; основ технологии получения систем обработки информации с плотностью компоновки до  $10^9$  элементов на кристалл и рабочими частотами порядка 1 ТГц; учебных программ разного уровня для подготовки специалистов в области физики, химии и технологии низкоразмерных (в том числе, наноразмерных) элементов, структур и систем.

## **2. ОСНОВНЫЕ ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ПРОГРАММЫ**

Основными принципами построения МПФИ являются комплексность и системность подходов, обеспечивающих выполнение ее разделов и, тем самым, создание теории НРС, физико-химических основ технологии НРС, комплекса рекомендаций электронно-оптическим и другим отраслям промышленности и формирования прогноза перспектив направлений развития нанотехнологии для Республики Беларусь.

Данная МПФИ не имеет ограничивающего срока по выполнению, поскольку решение разрабатываемых в ней проблем НРС (как основы для создания нанотехнологии), согласно имеющимся прогнозам, будет непрерывно осуществляться в течение ближайших 30-50 лет. Задания и темы, а также некоторые разделы МПФИ устанавливаются на определен-

ные периоды и сроки. По мере необходимости МПФИ дополняется и обновляется новыми составляющими.

Одним из принципов предлагаемой МПФИ является преимущество в разработке проблем физико-химии НРС, «частично или избирательно отражаемых в соответствующих программах ведущих ВУЗов республики, как существующих так и вновь разрабатываемых. Существенным принципом данной МПФИ также является ее взаимосвязь с другими ранее разрабатываемыми программами Минобразования и Академии Наук Беларуси. Тем самым данная МПФИ является основой целой системы фундаментального научного обеспечения проблемы "Нанотехнология".

Результативность МПФИ "Физические основы получения, диагностики, функционирования и применения низкоразмерных элементов и систем" будет заключаться в создании фундаментальной научной базы и физико-химических основ технологии формирования низкоразмерных систем (элементов, структур, материалов).

### **3. СТРУКТУРА ПРОГРАММЫ**

Концептуальная схема Межвузовской программы фундаментальных исследований "Физические основы получения, диагностики функционирования и применения низкоразмерных элементов и систем" состоит из следующих разделов:

1. Принципы технологии получения и диагностики материалов с низкоразмерным структурированием.
2. Свойства материалов с низкоразмерным структурированием.
3. Свойства ансамблей низкоразмерных элементов.
4. Низкоразмерные структуры.
5. Физические основы функционирования низкоразмерных систем.
6. Теория статических и динамических низкоразмерных систем.

Взаимодействие разных направлений программы представлено на блок-схеме программы.

В Разделе I разрабатываются основные физико-химические принципы технологии получения и методов метрологического контроля материалов, в которых или на основе которых могут быть реализованы низкоразмерные эффекты.

Раздел II посвящен исследованию свойств одиночных низкоразмерных элементов, реализующихся в различных материалах за счет их структурирования или внешних воздействий.

В Разделе III исследуются системы в виде ансамблей низкоразмерных элементов в прозрачных и непрозрачных матрицах.

Раздел IV включает изучение физических свойств низкоразмерных систем, искусственно получаемых методами нанотехнологии.

Раздел V разрабатывает физические принципы функционирования низкоразмерных систем.

Раздел VI формирует теоретическую базу описания физико-химических процессов, протекающих в НРС (материалах, элементах, структурах, системах).

#### **4. ОРГАНИЗАЦИЯ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ МПФИ**

МПФИ "Физические основы получения, диагностики, функционирования и применения низкоразмерных элементов и систем" на 1996-2000 годы и на перспективу должна функционировать по принципу комплексности разделов, взаимодополняемости отдельных заданий и с учетом развития ряда электронно-оптических отраслей промышленности республики в направлении нанотехнологии.

Организационные принципы МПФИ учитывают особенности научного потенциала ВУЗов республики; взаимодействие ВУЗов с институтами Академии Наук, отраслевыми НИИ и предприятиями республики; взаимосвязь с научными организациями стран дальнего и ближнего зарубежья; участие различных исследовательских групп в международных проектах.

Для оперативного научно-методического и организационного обеспечения выполнения работ по данной МПФИ и осуществления постоянной организационной связи между разделами, заданиями и их этапами создается Координационный Совет из числа ведущих ученых ВУЗов, постоянно отслеживающий ход выполнения Программы.

Функции Головной организации по данной МПФИ возлагаются на Белорусский государственный университет.

В ходе выполнения МПФИ ежегодно исполнители представляют информацию, в которой приводятся конкретные сведения об итогах выполнения НИР.

Для повышения эффективности выполнения МПФИ ежегодно (в начале декабря) Координационным Советом проводится Отчетная конференция с выступлениями руководителей по результатам выполняемых НИР.

Министерство образования и науки Республики Беларусь

«

**КРАТКИЙ ОТЧЕТ**

**о выполнении Межвузовской программы фундаментальных исследований Министерства образования и науки Республики Беларусь**

*"Физические основы получения, диагностики, функционирования и применения низкоразмерных элементов и систем"*

за 1996 год

В соответствии с задачами Программы и тематическим планом основные усилия в 1996 году были направлены на решение следующих **фундаментальных проблем**:

- » *Разработка основных физико-химических принципов технологии получения и методов контроля материалов с низкоразмерным структурированием;*
- » *Исследование свойств одиночных низкоразмерных элементов и их ансамблей, реализующихся в материалах с низкоразмерным структурированием;*
- *Разработка теоретической базы описания атомно-электронных процессов в низкоразмерных элементах и системах;*

В процессе решения указанных проблем в 1996 году получены следующие результаты:

Создана модель неоднородных и анизотропных фрактальных сетей и транспорта в них. Проведено изучение влияния внешних электрических полей на подвижность носителей заряда в неупорядоченных системах пониженной размерности.

Разработан новый принцип когерентного транспорта в наноструктурах с промежуточным полупроводником для высоких температур. Разработана модель когерентного электронного транспорта. Показано, что модель одноэлектронного туннелирования Лихарева является частным случаем предложенной модели. Проведены предварительные расчеты для ряда нанозлектронных приборов.

Создана физическая модель переноса двумерных и квазидвумерных электронов в инверсионном слое кремниевых МОП-структур, а также в структурах GaAs/AlGaAs с селективным легированием. Модель ориентирована на использование в сочетании с методом Монте-Карло. Проведены предварительные расчеты для ряда наноразмерных структур.

Создана квазиклассическая модель перехода металл-изолятор в кристаллических полупроводниках. Рассчитаны сужение запрещенной зоны и ширина линии спектра фотолюминесценции сильно легированных полупроводников.

Создана модель диффузии примесных атомов, в которой учитывается влияние деформации кристаллической решетки, зарядовые состояния, неоднородность распределений точечных дефектов, явление образования второй фазы, дрейф вследствие влияния внутреннего электрического поля. Проведены расчеты процесса переноса кислорода в кремнии вблизи границы раздела фаз.

Осуществлено теоретическое обоснование выбора параметров исходного гамильтониана электронной системы в модели независимых частиц. Осуществлена апробация разработанных алгоритмов реализации этой модели при расчете спектров возбужденных состояний легких атомов.

В рамках квантомеханических методов в кластерном приближении выполнены расчеты электронной структуры вакансионных комплексов в алмазе. Исследовано влияние водорода на электронную структуру вакансий и дивакансий в алмазе.

Установлено, что в жидких и твердо-жидких силикатных системах, полученных золь-гель методом, низкоразмерные частицы формируются на этапах гидролиза и поликонденсации, которые проходят по времени параллельно. Сформированные низкоразмерной структуры состоят из системы взаимосвязанных пор, стенки которых состоят из агломерированных частиц диоксида кремния. Размер агломерированных силикатных частиц достигает 0,1-1 мкм, а пор - 100-300 нм. На основе предварительных экспериментов созданы модельные композиционные системы кремний-силикатная матрица и изучены некоторые их электрофизические свойства.

На основе явления образования пространственных диссипативных структур в тонких слоях жидкости в неравновесных условиях были получены двумерные гексагональные сети гидратцеллюлозы с размером ячеек порядка 1 мкм и менее и шириной границ ячеек - 100 нм и менее. Таким образом разработан нелитографический метод создания низкоразмерных мезоскопических перманентных сетей с наноразмерными связями. Введение в исходный раствор нитроцеллюлозы определенного количества хлористого олова позволяет формировать пространственные структуры из композиционного оловосодержащего материала в виде нанокристаллитов, однородно внедренных в матрицу в результате реакции гидролиза  $\text{SnCn}$ , проходящей в процессе структурообразования. Такие структуры могут иметь резкие и фрактальные контуры границ. Их последующая термообработка приводит к образованию двумерных сетей из композиционного материала на основе модифицированной матрицы с укрупненными кристаллитами  $\text{SnO}_2$ .

Изготовлены структуры Металл/Кремний нанесением покрытий в условиях саморадиации, когда отношение  $I/A$  ( $I$  - концентрация ионов,  $A$  - концентрация атомов наноси-

мого металла) изменялось от 0.1 до 0.4 при измеренной скорости нанесения покрытий в интервале 0.01-0.04 нм/с. Энергия ионно-ассистирующего облучения варьировалась от 5 до 20 кэВ. Методом резерфордского обратного рассеяния ионов гелия с энергией 2.0 МэВ установлено наличие в покрытиях примесей углерода и кислорода, а также кремния, механизм появления которого частично обусловлен миграцией атомов кремния из материала основы при атомном перемешивании во время облучения формирующегося покрытия ускоренными ионами наносимого металла.

Мезоскопические целлюлозные сетчатые структуры были сформированы в граничном слое раствора нитроцеллюлозы в амилацетате и воды на основе эффекта Бенара-Марангони вследствие химических изменений. Средний размер образующихся гексагональных ячеек составил 2 мкм и менее. Ширина связей была на 1-1.5 порядка меньше. С помощью растровой электронной и просвечивающей микроскопии проведены измерения структурных свойств низкоразмерных углеродных сетей на диэлектрических ( $Al_2O_3$ ,  $SiO_2$ ) и кремниевых подложках. Установлено, что высокотемпературный отжиг ( $950^\circ C$ , 10-5 Торр, время отжига больше 12 часов) сеток из карбонизированной целлюлозы на подложках  $SiCVSi$  приводит к синтезу нового соединения, элементный и фазовый состав которого изучается в настоящее время. На подложках кремния после указанного выше процесса отжига образуется аморфный углерод.

Обобщены принципы синтеза одномерных углеродных структур путем фазовой модификации углерода в результате воздействия высокоэнергетичных частиц. Правильность указанных принципов продемонстрирована на примере создания фуллереноподобных структур - тубеленов, то есть трубок с диаметром нанодиапозона в монокристаллах алмаза, имплантированных ионами с энергией 1-6 МэВ/аеи. В согласии с экспериментом, теоретически доказана возможность существенного влияния центров с короткими временами релаксации (например парамагнитных молекул кислорода) на спектр ЭПР центров с длинными временами релаксации в углеродных материалах и возможность формирования резонансной линии нового типа с характерной суперлоренцевой формой.

Получены образцы, представляющие собой ансамбль одномерных практически чисто углеродных элементов, на основе монокарбоксилцеллюлозы, термообработанной в собственной газовой атмосфере, а также при термообработке исходной целлюлозы и природных биополимеров. Сопоставление спектров ЭПР образцов, полученных в результате термообработки монокарбоксилцеллюлозы, исходной целлюлозы и природных биополимеров со спектрами ЭПР одномерных структур, образующихся в монокристаллах алмаза, имплантированных ионами с энергией 1-6 МэВ/аеи позволяет предположить фуллереноподобное строение образцов монокарбоксилцеллюлозы, термообработанной в собственной газовой атмосфере.

Разработан новый способ получения коллоидных растворов на основе низкоразмерных частиц оксида железа (II, III). Показано, что дисперсная фаза образца магнитной жидкости, полученной разработанным способом, характеризуется более высокой дисперсностью - размер частиц дисперсной фазы составляет 5-6 нм (для образцов получаемых традиционными методами -8-10 нм). С помощью созданной аппаратуры измерены и исследованы мессбауэровские спектры ферромагнитной жидкости (ФМЖ), полученной традиционным методом, а также коллоидных растворов на основе низкоразмерных частиц оксида железа (II, III) и декана. Показано, что гамма-резонансные спектры обычной ФМЖ отвечают мелкодисперсному соединению  $Fe_3O_4$  с размером частиц 8-10 нм. Коллоидные растворы на основе оксида железа (II, III) и декана характеризуются более высокой дисперсностью и в них присутствуют парамагнитные соединения железа с концентрацией около 15%.

Разработан метод синтеза сополимеров N-изопропилакриламида с n-гептадецилвинилкетонем с исходным содержанием гидрофобного компонента 1,2, 5,10,15 и 20 шо1%. Разработана методика очистки полученных сополимеров. Проведен анализ количественного состава сополимеров методом ПМР. Изучены электрофизические свойства мембран модифицированных данными сополимерами. Показано, что они могут играть роль каналоформера, обеспечивающего транспорт ионов через мембрану.

Разработаны методы получения липидных бислойных ламелл и мембран с заданными структурными характеристиками, содержащих различное количество молекул пигмента в мономерном состоянии. На основе результатов исследования характеристик тушения флуоресценции различных пигментов водорастворимым тушителем (антрахинон-2,6-дисульфокислота), определены параметры внутримембранной локализации пигментов. Полученные результаты показывают, что изменение структурных и биохимических характеристик биологических мембран, несущих порфириновые пигменты, может сопровождаться значительными изменениями внутримембранного распределения и, как следствие, изменениями скорости перераспределения пигментов между мембраной и средой.

Подготовлена серия тонкопленочных (толщиной 60 нм) образцов сплава Fe-30% Ni. Пленки готовились методом электронно-лучевого испарения в вакууме на свежие сколы монокристаллов хлорида натрия и бериллиевые фольги. Проведена имплантация ионов  $Ag^+$  с концентрацией  $5 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ . Исследование в электронном микроскопе на просвет показало, что в имплантированных ионами аргона образцах в результате отжига формируется поровая система. Поры локализуются преимущественно у границ зерен и имеют размеры от 10 до 40 нм.

Установлены закономерности и характерные особенности формирования ансамбля рекомбинационно-активных комплексов в особо чистом германии. Изучение профиля радиального распределения времени жизни неравновесных носителей заряда в особо чистом

германии показало, что рекомбинационные центры, связанные с комплексами на основе быстродиффундирующих примесей, образуют хаотическую структуру. Предполагается, что формирование структуры происходит в результате развития двух различных процессов в движущемся расплаве германия. Показано, что процесс легирования связан не с миграцией

изолированных атомов фосфора, а диффузией молекул ортофосфата неодима, сопровождающейся активацией фосфора на границе раздела твердой и жидкой фаз.

Изучены особенности формирования одномерных структур (треков) в сверхтвердых материалах и кремнии, облученных высокоэнергетичными ионами Ni и Xe, а также влияние термообработки на эти структуры. Исследования ЭПР образцов алмаза, имплантированных ионами Ni с энергией 335 МэВ в интервале  $5 \cdot 10^{12} - 5 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$ , показали, что такое облучение приводит к формированию сложной дефектной области, состоящей из точечных дефектов и одномерных упорядоченных трекоподобных нететраэдрических структур, резонансное поглощение в которых обусловлено солитонами. В дозовой зависимости концентрации ПЦ ТД, созданных облучением ионами Ni с энергией 335 МэВ и ионами Xe с энергией 5.68 ГэВ, в первом интервале доз  $5 \cdot 10^{12} - 5 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-2}$  (Ni) и  $5 \cdot 10^{10} - 5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$  (Xe) наблюдается сублинейная зависимость. Это свидетельствует о постепенном накоплении точечных дефектов и их рекомбинации в процессе облучения в пределах треков отдельных ионов. При этих дозах треки отдельных ионов еще не перекрываются и находятся на расстоянии, не позволяющем аннигилировать дефектам из различных треков.

Разработаны и исследованы инжектирующие электроны и дырки контакты, получаемые методом ионной имплантации. Инжектирующие электроны контакты изготовлены имплантацией ионов лития дозой  $2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$ , инжектирующие дырки - имплантацией ионов бора  $2 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-2}$  с последующим высокотемпературным отжигом. Дозы имплантации в обоих случаях превышают критическую дозу аморфизации, при этом образующийся заграфитизированный приповерхностный слой служит в качестве омического контакта к заглубленным слоям p- и r-типа проводимости. Исследования вольтамперных характеристик изготовленных p-i-n структур подтверждают наличие тока двойной инжекции в диэлектрическом алмазе.

Обнаружены и исследованы микроскопические деформации (увеличение объема и линейных размеров) полимерных материалов в результате превращений карбонильных производных бензола в электронно-возбужденных состояниях. Определены основные возможности применения эффекта для регистрации поглощенной дозы УФ и более жестких излучений. Проведена проработка способов синтеза ароматических полимеров с повышенным коэффициентом поглощения, способных служить донорами энергии электронного возбуждения для карбонильных производных бензола.

Исследованы нелинейные оптические процессы в полупроводниковых микрокристаллах CuS, Cu<sub>2</sub>S, CuInS<sub>2</sub> и CdTe. Установлено, что быстрорелаксирующее (десятки пс)

наведенное поглощение отличается по спектральному диапазону от долгоживущего (наносекунды). Оба процесса вызваны поглощением носителей из разного типа ловушечных состояний, их интенсивность возрастает с увеличением интенсивности возбуждающего лазерного импульса, а характерное время определяется составом полупроводника.

Синтезированы нанокристаллы  $\text{CuS}$ ,  $\text{Cu}_{12}\text{S}$ ,  $\text{CuInS}_2$  в полимерной пленке, которые в процессе приготовления подвергались частичному оксидированию. В образцах наблюдалась дополнительная широкая полоса поглощения с максимумом при 1.2 мкм, обусловленная присутствием в оксидированных образцах меди  $\text{CuIn}$ , которая формирует уровни энергии в запрещенной зоне полупроводника с характером донора электронов, и переносом заряда лиганд-металл.

Разработана конструкция сканирующего туннельного микроскопа для электрохимических применений; проведена сборка прибора; для тестового образца (скол пиролитического графита) получено атомное разрешение на воздухе. Проведено исследование взаимосвязи спектров гигантского комбинационного рассеяния (ГКР) структурного пиримидинового компонента тиамин и микроструктуры поверхности серебряного электрода (полученной *ex-situ* при помощи атомного силового микроскопа) подвергнутого различным окислительно - остановительным циклам. Установлено, что на интенсивность спектров ГКР соединений тиамин оказывают влияние как механизм электромагнитного дальнего действия, так и молекулярный короткодействующий механизм.

Разработана теоретическая модель для описания контуров вибронных полос адсорбированных сложных молекул, продемонстрирована ее работоспособность. Предложен критерий поиска систем с малыми однородными ширинами при относительно высоких температурах - малость дефектов частот локальных колебаний.

Разработан нелитографический метод создания низкоразмерных мезоскопических перманентных сетей с наноразмерными связями. На основе явления образования пространственных диссипативных структур в тонких слоях жидкости в неравновесных условиях получены двумерные сети гидратцеллюлозы с размером ячеек порядка 1 мкм и менее и шириной границ ячеек - 100 нм и менее. Форма ячеек близка к правильной шестигранной. В таких сетях на основе аморфного углерода изучен линейный и нелинейный транспорт заряда в сильных электрических полях и температурные зависимости электропроводности. Наблюдаемые явления объяснены на основе предположения о перколяционном транспорте заряда в электрическом поле по сети с фрактальной размерностью. Нелинейность вольтамперных характеристик описана моделью динамической неупорядоченной резисторной сети при существенно высокой локальной напряженности электрического поля, когда непроводящие каналы становятся проводящими.

Изучены электрические режимы осаждения, составы электролитов и кинетика электрохимического осаждения эрбия в экспериментальные структуры на основе низ-

коразмерного пористого кремния п- и р-типов проводимости с различной кристаллографической ориентацией и удельным сопротивлением. Оптическую активацию проводили термообработкой экспериментальных структур в диффузионной печи при температуре 1200° С на воздухе и секундным отжигом при температуре 800 -1150° С в течение 30 секунд. Установлено влияние структуры пористого кремния и условий его термообработки на спектры излучения легированных эрбием структур. Предложен механизм возбуждения и излучения в структурах на основе низкоразмерного пористого кремния.

Результаты проведенных исследований по 28 темам были доложены на отчетной конференции 11 декабря 1996 года. По результатам исследований в 1996 опубликовано и подано в печать 42 статьи, сделано 23 доклада на конференциях.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР, ПОЛУЧАЕМЫХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ

Потоцкий И.В., Подденежный Е.Н.

Гомельский государственный университет

### Введение

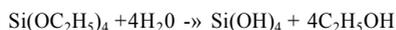
Для дальнейшего прогресса наукоемких отраслей электронной и оптической промышленности в направлении нанотехнологии требуется разработка физико-химических принципов построения низкоразмерных структур на основе смешанных силикатных систем, находящихся в коллоидном состоянии и претерпевающих структурно-физические переходы от жидких зольей к структурированным гидрогелям, далее ксерогелям (сухим гелям) и аморфной стекломатрице.

В алкоксидном варианте золь-гель процесса получения стекломатрицы наночастицы формируются в жидкой среде путем реакций гидролиза, полимеризации и поликонденсации, которые проходят во времени параллельно. В такие системы можно вводить на этапах приготовления исходных смесей, гидролиза или золеобразования вторые твердые фазы либо той же природы (например, аморфные частицы аэросилов наноразмерного масштаба), либо частицы других фаз, пассивно или активно взаимодействующих с частицами первично формируемой фазы (например, порошков, металлов, полупроводников). Такие системы, будучи приведены к конденсированному состоянию, будут обладать уникальными свойствами, основанными на размерных эффектах, эффектах химического и физического взаимодействия наночастиц с матрицей основы.

### Методика приготовления модельной системы

Смешанная твердо-жидкофазная коллоидная система на основе силикатных гидролизатов тетраэтоксилана (ТЭОС) и твердых частиц аэросила и кремния была приготовлена по технологической схеме, приведенной на Рис. 1.

Общая суммарная реакция гидролиза представлена уравнением:



Для создания твердо-жидкофазной системы в нее вводили хорошо диспергированную суспензию коллоидных сферических частиц аэросила А-300 в водно-кислотной среде

(pH=2-3). Для получения гидрогеля золь-коллоидную систему подвергали гелеобразованию путем сдвига pH в сторону повышения с помощью водного раствора аммиака (pH=10-12).

Вместо порошка кремния возможно введение в матрицу солей металлов с дальнейшим спеканием на воздухе и последующим восстановлением образующихся оксидов в атмосфере водорода. Предварительные эксперименты осуществлены на системе SiVCuOj. При этом получается композит с частичками меди размером порядка 10 нм.

### Электрофизические и ЭПР-исследования композитов SiC<sup>^</sup>/Si

Зависимости удельного сопротивления композитов с различными концентрациями и размером полупроводниковой фазы (n-Si,  $\rho \gg 500$  Ом.см) показаны на Рис. 2. Удельное сопротивление композитов высокое и незначительно зависит от концентрации кремния, т. к. концентрация Si недостаточна для образования токопроводящих цепочек, но значительно снижается при увеличении частоты электрического поля в диапазоне  $10^2$ - $10^6$  Гц, что характерно для прыжковой проводимости.

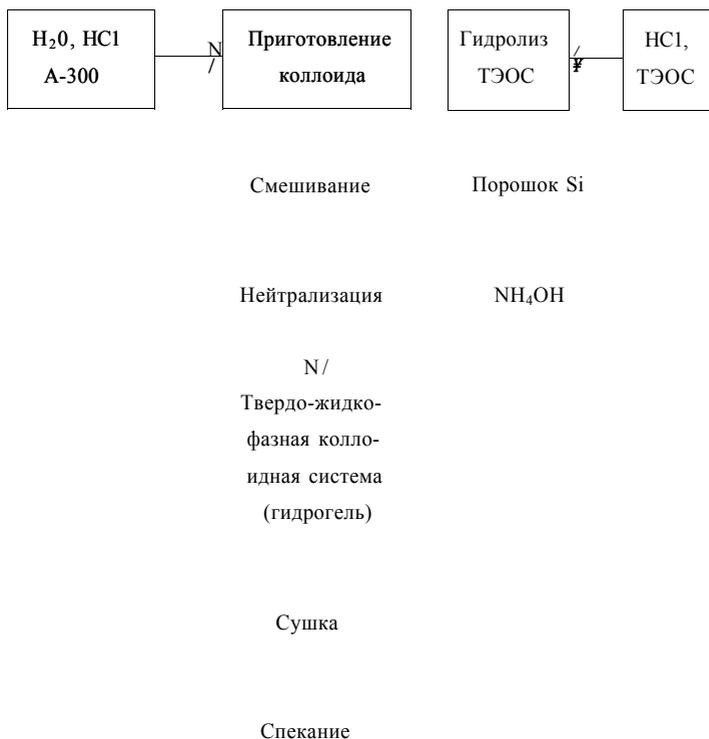


Рис. 1. Технологическая схема приготовления модельной системы SiC/Si.

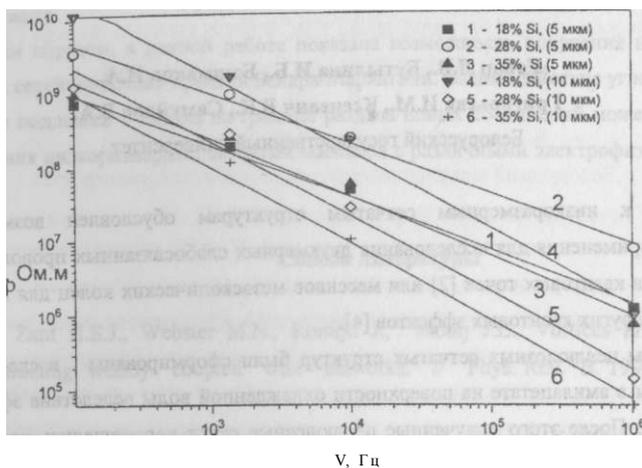


Рис.2. Зависимость удельного сопротивления композитов  $\rho$  от частоты электрического поля.

Исследование парамагнитных свойств композитных материалов SiCVSi с концентрацией кремния 4.3-24 мас.% показали, что в образцах при комнатной температуре наблюдается сигнал ЭПР с  $g=2.035-2.046$  и шириной линии ДН@140 Гс. Сигнал связан, по-видимому, с проявлением давления матрицы на микрокристаллы Si. Уширение линии вызвано широким гранулометрическим распределением частиц кремния. Сигнал не наблюдается на исходном порошке кремния и стекломатрице, полученной по той же технологии.

### Заключение

1. Изучены физико-химические основы процессов гидролиза и гелеобразования в смешанных коллоидных системах (золь-аэросил; золь-аэросил-кремний).
2. Изучены некоторые электрофизические и парамагнитные свойства модельных золь-гель систем.
3. Дальнейшее направление работ - создание и исследование золь-гельных композитов с полупроводниками меньшего размера (<1 мкм) и металлическими порошками (Fe, Co, W, Si).

## ФОРМИРОВАНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР

Говор Л.В., Бутылина И.Б., Башмаков И.А.,  
Григорьева И.М., Ксеневиц В.К., Самуилов В.А.

Белорусский государственный университет

Интерес к низкоразмерным сетчатым структурам обусловлен возможностью практического применения для исследования двумерных слабосвязанных проволочных сетей [1], массивов квантовых точек [2] или массивов мезоскопических колец для незатухающих токов [3] и других квантовых эффектов [4].

Массивы целлюлозных сетчатых структур были сформированы в слое раствора нитроцеллюлозы в амилцетате на поверхности охлажденной воды вследствие эффекта Бенара-Марангони. После этого полученные целлюлозные сетки перемещались на подложки поли-АВОз, SiO<sub>2</sub>/Si, Si и подвергались высоковакуумному ( $10^{-5}$  Торр) отжигу при 950 °С и времени отжига 6,12,18,24 часа. Использование различных подложек и времени отжига позволяло установить закономерности формирования углеродных структур и их химического взаимодействия с элементами подложечного материала в процессе высокотемпературного отжига. Средний размер образующихся гексагональных ячеек составил 1-2 мкм, ширина связей 0.05-0.1 мкм.

Возможность отжига массивов целлюлозных сеток до столь высоких температур с определенным сохранением их массы и фактуры кажется на первый взгляд неожиданной. Однако известно (5), что на скорость и механизм распада нитроцеллюлозы, помимо температуры, оказывают влияние первичные газообразные продукты, образующиеся при отщеплении нитратных групп. При быстром отводе газообразных продуктов в условиях динамического вакуумирования с поверхности тонкой нитроцеллюлозной пленки термические превращения остова практически не отличаются от процессов, протекающих при получении из целлюлозы угольных волокнистых материалов (6).

С помощью растровой электронной и просвечивающей микроскопии проведены измерения структурных свойств низкоразмерных углеродных сетей на диэлектрических и полупроводниковых подложках. Установлено, что высокотемпературный отжиг (время отжига - более 6 часов) сеток целлюлозы на подложках SiO<sub>2</sub>/Si приводит к синтезу нового соединения, элементный и фазовый состав которого изучается в настоящее время. Более кратковременный отжиг (6 часов) не приводит к указанному выше результату. Не установлено также взаимодействие между целлюлозой и Si после 18-часового отжига. Электронограммы не взаимодействующих с подложкой (указанных выше) образцов указывают на определенную степень кристалличности углеродных сетчатых структур. Причем отжиг в течение 6 и 18 часов приводит к одной и той же электронограмме. Это означает, что для изменения степени

кристалличности получаемых таким образом углеродных сетей необходимо увеличить температуру отжига.

Таким образом, в данной работе показана возможность получения низкоразмерных углеродных сетей на основе эффекта Бенара-Марангони. Взаимодействие углеродных сеток с материалом подложки и синтез на границе раздела новых соединений может явиться основой получения низкоразмерных сетчатых массивов с различными электрофизическими свойствами.

#### Список литературы

1. Van der Zant H.S.J., Webster M.N., Romijn J., Mooij J.E.. Vortices in twodimensional superconducting weakly coupled wire networks. // Phys. Rev. B. 1994. V. 50, N 7. P. 340-350.
2. Weiss D., Roukes M.L., Meschig A., Grambow P., Von Klitzing K., Weinman G.. Electron Pinball and Commensurate Orbits in a Periodic Array of Scatterers. // Phys. Rev. Lett. 1991. V. 66. N 21. P.2790-2793.
3. Levy L.P., Dolan G., Dunsmuir J., Bouchiat H.. Magnetization of Mesoscopic Cooper Rings: Evidence for Persistent Currents. // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. N 17. P.2074-2077.
4. Webb R.A., Washburn S. // Physics Today. 1988. December. P.46.
5. Андреев К.К., Самсонов Б.С.. Теория взрывчатых веществ. М.1968.
6. Ермоленко **И.Н.**, Люблинер Н.П., Гулько **Н.В.** Элементосодержащие угольные волокнистые материалы. Мн. 1982.

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ Ag CO  
СТРУКТУРАМИ Co/Si ПРИ ИОННО-АССИСТИРОВАННОМ НАНЕСЕНИИ ТОН-  
КИХ ПЛЁНОК КОБАЛЬТА НА КРЕМНИЙ**

**Бобрович О.Г., Тульев В.В., Ташлыков И.С.**

Белорусский государственный технологический университет

Ионно-ассистированное нанесение покрытий (ИАНП) рассматривается в настоящее время одной из прогрессивных технологий модифицирования разнообразных свойств поверхности [1]. Межфазная граница раздела покрытие/матрица или изделие, которую мы рассматриваем в качестве низкоразмерной среды (НР), играет принципиальную роль в обеспечении стабильности свойств наносимого покрытия. Поэтому одной из целей проводимого исследования является изучение взаимодействия высокоэнергетических динамических нуль-размерных элементов (ДНРЭ), в качестве которых использованы ионы аргона с энергией  $20$  и  $500$  эВ, с низкоразмерной средой при нанесении на кремний покрытий кобальта методом распыления с осаждением на Si подложку нуль-размерных нейтральных элементов (НРНЭ) атомов кобальта со скоростью  $R_d = 3.4 - 10.2 \times 10^{14}$  ат/(см<sup>2</sup>с). Измеренное в опытах отношение ДНРЭ к НРНЭ составляло от 0.1 до 0.9 ион/атом. Взаимодействие ДНРЭ с формирующей; при ИАНП низкоразмерной средой изучали с применением метода резерфордского обратного рассеяния (РОР) ионов гелия с  $E_0 = 2.0$  МэВ.

При установившемся режиме процесса ИАНП темп захвата ДНРЭ уравнивается распылением захваченных ранее атомов Ag из приповерхностной области растущей плёнки В этих условиях, когда растёт толщина покрытия, слоевая концентрация аргона  $N_t(\text{Ar})$  слоевая концентрация НРНЭ  $N_t(\text{Co})$  становятся независимыми от положения поверхности. Если коэффициент распыления поверхности при динамическом равновесии  $Y$ , а вероятной захвата ДНРЭ  $\tau$ , тогда применимы уравнения, описывающие темп роста плёнки ( $R_{Co}$ ) в условиях равновесного процесса

$$R_{Co} = R_d \sim J_i Y. \quad \text{CD}$$

где  $J_i$  - плотность потока ионного ассистирования, и отношение слоевых концентраций Кобальта и аргона в покрытии

$$\frac{N_t(\text{Co})}{N_t(\text{Ar})} = \frac{R_{Co}}{R_{Ar}} = \frac{R_d - J_i Y}{J_i Y}$$

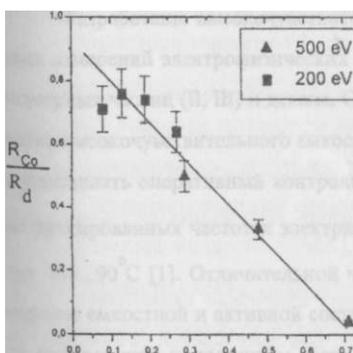
Данные уравнения можно переписать в удобной для анализа форме

$$\frac{R_{Co}}{R_d} = 1 - \sqrt{\frac{J_{Ar}}{J_{Co}}} \quad (3)$$

$$\frac{Nt(Co)}{Nt(Ar)} = \frac{R_d}{J_{Ar}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{J_{Ar}}{J_{Co}}}} \quad (4)$$

Аналитические выражения (3) и (4) удобны для определения зависимостей параметров покрытий от режимов ИАНП.

Например, теоретически предсказывается (уравнение 3), что отношение  $IWR_d$  должно быть линейной функцией  $J_{Ar}/J_{Co}$  с коэффициентом  $\gamma$ . Отношение  $Nt(Co)/Nt(Ar)$  должно быть в соответствии с уравнением (4) линейной функцией отношения  $R^{\wedge}/J_j$  с коэффициентом  $1/\sqrt{\gamma}$  и началом в точке  $\gamma/4$ . Следовательно, проводя эксперимент, можно проверить его соответствие теоретическому предсказанию, а также рассчитать соответствующие коэффициенты распыления к захвата ДНРЭ. Действительно, за исключением одной точки экспериментально полученные данные подтверждают в пределах погрешности линейную зависимость отношения  $R_{Co}/R_d$  от  $J_{Ar}/J_{Co}$  (Рис. 1). При этом коэффициент распыления наносимого  $Co$  покрытия ионами  $Ag^+$  с Е-200 и 500 эВ оказывается приблизительно одинаков и равен 1.47. Полученные значения  $\gamma$  превышают теоретически рассчитанные ( $\gamma(200 \text{ эВ})=0.5$  и  $\gamma(500 \text{ эВ})=1.3$ ) значения [2], что, по-видимому, можно связать с различной кристаллической структурой кобальта в формируемом покрытии и в массивном образце.



- 200 eV
- ▲ 500 eV

Рис. 1. Отношение скорости осаждаемого кобальта к скорости наносимого как функция  $J_{Ar}/J_{Co}$ .

Рис. 2. Отношение слоев концентрации нанесенного  $Co$  к захваченному  $Ag$  как функция  $R_d/J_{Ar}$ .

Данные на Рис. 2 также соответствуют предсказанной уравнением (4) линейной зависимости соответствующих отношений.

В результате выполненного исследования взаимодействия ДНРЭ с НР установлено что темп нанесения  $Co$  уменьшается с ростом плотности ионного тока в результате распыления растущей плёнки с коэффициентом 1.47. Относительная концентрация  $Ag$  в покрытии уменьшается со снижением плотности тока ионов  $Ag^*$ , а также со снижением энергии ДНРЭ.

#### **Список литературы**

1. Colligon J.S. // J.Vac.Sci.Technol. 1995. A13. P.1649.
2. Matsunami N., Yamamura Y., Itikawa Y. et al. // IPPJ-AM. 1983. 32. P.84.

**ИССЛЕДОВАНИЕ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ  
НА ОСНОВЕ  $Fe_3O_4$  ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИМ МЕТОДОМ И МЕТОДОМ ЯДЕРНО-  
ГО ГАММА-РЕЗОНАНСА**

**Воробьева С.А., Зубко В.И., Лесникович А.И., Мушинский В.В.,  
Сицко Г.Н., Собаль Н.С., Холмецкий А.Л.  
Белорусский государственный университет**

Разработан новый способ получения коллоидных растворов на основе низко-размерных частиц оксида железа (II, III) и декана, заключающийся в получении высокодисперсного оксида железа (II, III) в результате щелочного гидролиза солей двух и трехвалентного железа в присутствии олеата натрия и соляной кислоты и последующем диспергировании полученного осадка в декане. Проведено физико-химическое исследование полученного образца в сравнении с образцами магнитных жидкостей, получаемых традиционными методами. Показано, что дисперсная фаза образца магнитной жидкости, полученной разработанным способом, характеризуется более высокой дисперсностью - размер частиц дисперсной фазы составляет 5...6 нм (для образцов, получаемых традиционными методами - 8...10 нм). Полученные результаты имеют важное значение для разработки научных основ химии и технологии получения низкоразмерных частиц и материалов на их основе.

Разработаны высокочувствительный емкостной первичный преобразователь и методика измерений электрофизических характеристик коллоидных растворов на основе низко-размерных частиц (II, III) и декана. Существенной новизной данной разработки является создание высокочувствительного емкостного преобразователя, конструкция которого позволяет осуществлять оперативный контроль электрофизических параметров коллоидных растворов на фиксированных частотах электрического поля  $\omega \cdot 10^3$ ,  $\omega$  и  $10^*$  Гц в интервале температур  $-30...90$  С [1]. Отличительной чертой разработанной методики является раздельное измерение емкостной и активной составляющих импеданса измерительной ячейки конденсатора, заполненной коллоидным раствором. Измерение электрофизических параметров производили с помощью импедансметров, в которых предусмотрен вывод текущих результатов на цифровое табло приборов либо на экран компьютера. Определяемые электрофизические характеристики: относительная диэлектрическая проницаемость ( $\epsilon$ ), удельное электрическое сопротивление ( $\rho$ ) и тангенс угла диэлектрических потерь ( $\text{tg}\delta$ ). Точность измерений электрофизических параметров емкости (С) и проводимости (О) измерительной ячейки конденсатора, заполненной раствором, составляет  $\pm 0,1\%$  [2, 3].

С помощью созданных высокочувствительного первичного преобразователя и методики измерений исследованы изменения относительной диэлектрической проницаемости, удельного электрического софотивления и тангенса угла диэлектрических потерь коллоидных растворов на основе низкоразмерных частиц оксида (II, III) и декана, полученных традиционным и вновь разработанными методами. Исследованы электрофизические характеристики коллоидных растворов при различной концентрации дисперсной фазы ДФ (5...35%) для фиксированных частот электрического поля:  $10^2, 10^3, 10^4$  и  $10^6$  Гц .

Анализ концентрационной зависимости для различных частот электрического поля свидетельствует о существовании концентрационной области ДФ, характеризуемой резким изменением типов проводимости исследуемых коллоидных растворов. Если при низких концентрациях ДФ основной вклад вносят свободные заряды, то в области высоких концентраций начинают преобладать поляризационные явления. При относительно низких концентрациях ДФ имеет место наиболее выраженное изменение  $\rho$ . Величина  $\rho$ , наоборот, больше изменяется в области высоких концентраций ДФ. При этом выраженное изменение в зависимости от концентрации ДФ претерпевает величина тангенса угла диэлектрических потерь, экстремальное значение которого лежит в критической концентрационной области (15...25%). Это позволяет предположить существование качественно различных структурных состояний коллоидных растворов, полученных на основе низкоразмерных частиц оксида железа (II, III) и декана при низких и высоких концентрациях ДФ. Выявлено различие абсолютных величин  $\epsilon$ ,  $\rho$  и  $\text{tg}\delta$  коллоидных растворов, полученных традиционным и вновь разработанным методом.

Разработанные высокочувствительный первичный преобразователь и методика измерений позволили определить оптимальные частоты электрического поля и концентраций ДФ, в пределах которых электрофизические характеристики наиболее чувствительны к изменениям структурных состояний коллоидных растворов, полученных на основе низкоразмерных частиц оксида (II, III) и декана.

При подготовке и проведении мессбауэровских измерений низкоразмерных частей прежде всего требовалось существенное повышение чувствительности гамма-резонансных измерений по сравнению со стандартной, из-за малых значений величины резонансного эффекта в таких объектах. Единственный способ решения этой задачи состоит в повышении нагрузочной способности тракта гамма-спектрометрии мессбауэровского спектрометра. При этом нами было обращено внимание на то, что сопутствующее снижение спектральных характеристик быстродействующего детектора гамма-квантов не имеет существенного значения, поскольку зависимость регистрируемой величины резонансного эффекта

от спектрометрической селективности детектора имеет вид кривой с насыщением [4]. Эта идея легла в основу разработки спектрометрического тракта на основе нового сцинтилляционного детектора  $YAlO_3:Ce$ , реализованного в настоящей работе. Такой детектор имеет сравнимые спектрометрические характеристики со стандартным детектором  $NaI(Tl)$ , превышая его по быстродействию на порядок. Разработка соответствующей быстродействующей системы для усиления и амплитудной селекции сигналов детектора  $YAlO_3:Ce$  позволила обеспечить загрузочную способность тракта спектрометрии мессбауэровского спектрометра для исследования низкоразмерных частиц не хуже 10 имп/с. Это открывает возможность исследования резонансных линий с величиной эффекта менее 0.1%, что более чем достаточно для проведения количественных исследований низкоразмерных систем.

Наличие релаксационных процессов в низкоразмерных системах, характерные времена которых сравнимы со временем жизни возбужденного мессбауэровского ядра железо-57, и их сильная температурная зависимость требуют проведения измерений в достаточно широком температурном интервале (по крайней мере, от азотных до комнатных температур). Для реализации таких измерений разработан универсальный малогабаритный азотный криостат с системой термостатирования в требуемом температурном интервале (-196...20°C). Для снижения расхода азота в критической точке  $T = -196^\circ C$  (что особенно важно при проведении долговременных мессбауэровских измерений), криостат работает в погружном режиме. При этом расход жидкого азота составил не более 100 мл/час.

Проведено сопряжение быстродействующего тракта спектрометрии и универсального азотного криостата с автоматизированным на базе IBM PC мессбауэровским спектрометром. Созданный комплекс аппаратуры является эффективным средством исследования фазового состава, динамических свойств и структурных характеристик низкоразмерных систем.

С помощью созданной аппаратуры измерены и исследованы мессбауэровские спектры ферромагнитной жидкости (ФМЖ), полученной традиционным методом, а также коллоидных растворов на основе низкоразмерных частиц оксида железа (II, III) и декана. Показано, что гамма-резонансные спектры обычной ФМЖ отвечают мелкодисперсному соединению  $Fe_3O_4$  с размером частиц 8...10 нм. Коллоидные растворы на основе оксида железа (II, III) и Декана характеризуется более высокой дисперсностью и в них присутствуют парамагнитные соединения железа с концентрацией около 15%.

\*                    **Список литературы**

1. Зубко В.И., Сицко Г.Н., Коробов В.А., Вислович А.Н., Бердник Н.К. Электрофизические свойства магнитных жидкостей. // Тезисы докладов Международной Плесской конференции по магнитным жидкостям. Плесс. Россия. 1996. С.40.
2. Ахвердов И.Н., Зубко В.И., Потоцкий И.В., Проневич И.И. Композиционный резистивный материал на основе кремния. // Весті АН Беларусі, Сер. фіз.-тэхн. навук. 1996. N 3. С. 3.
3. Ахвердов И.Н., Зубко В.И., Проневич И.И., Потоцкий И.В., Мельниченко И.М., Подцenneжный Е.Н. Влияние дисперсности и концентрации токопроводящей фазы на электрофизические свойства композиций кремний-стекло. // Весті АН Беларусі, Сер. фіз.-тэхн. навук. 1996. N4. С. 3.
4. Fyodorov A.A., Kholmetskii A.L., Korhzik M.V. et al. // Nucl. Instrum. & Meth.. 1994. B88 P. 462.

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА С ФУЛЛЕРЕНОПОДОБНЫМИ УГЛЕРОДНЫМИ СТРУКТУРАМИ

**Башмаков И.А., Стельмах В.Ф., Стригуцкий Л.В.**

Белорусский государственный университет

Исследования ЭГР образцов монокарбоксилцеллюлозы, исходной целлюлозы и образцов на основе природных углеродсодержащих материалов, термообработанных в собственной газовой атмосфере при температуре от 200 °С до 1000 °С с интервалом 50 °С проводились на воздухе и в вакууме. На основе наблюдаемых ослаблении степени насыщения образцов мощностью СВЧ, падения амплитуды сигнала ( $I_{np} > x$ ), практического отсутствия уширения спектральной линии при уменьшении произведения  $1_{\text{тах}}(5H_{\text{тах}})^2$ , где  $6H_{\text{тал}}$  - расстояние между пиками спектральной линии и связанного с данными факторами изменения формы линии под воздействием парамагнитных молекул кислорода, имеющих короткие времена релаксации, была предложена и обоснована модель их взаимодействия с фуллереноподобными углеродными парамагнитными центрами (ПМЦ).

При наличии в образце центров с существенно различными временами релаксации ПМЦ с короткими временами  $T_1$  создают в месте расположения центров с большими временами релаксации  $T_2$  флуктуирующее магнитное поле [1], что вызывает дополнительное уширение  $6H$  спин-пакета последних вследствие уменьшения его времени релаксации:

$$5H_s = g\mu_B T_1 [ \langle (H_z)^2 \rangle + \langle (H_y, 0)^2 \rangle / (1 + (cD_0)^2 (T_1)^2) ] / h \quad (1)$$

где  $g$ -фактор спектроскопического расщепления;  $\mu$  и  $h$  - физические константы;  $\langle (H_z)^2 \rangle$  и  $\langle (H_y, 0)^2 \rangle$  - среднеквадратичные компоненты флуктуирующего поля, создаваемого центрами с короткими временами релаксации в точке расположения ПМЦ с большими временами релаксации в направлениях, параллельном и перпендикулярном постоянному магнитному полю  $H$ ;  $\omega$ -рабочая частота радиоспектрометра.

В большинстве случаев  $T_2 > T_1 > 1/m_0 ((cD_0)^2 (T_1)^2 > 1)$  и вторым членом можно пренебречь. Тогда выражение для ширины сигнала углеродных ПМЦ, обусловленное влиянием ближайшего примесного центра, пр; имеет вид:

$$6H = g\mu_B n^2 T_1 (1 - 3 \cos^2 \theta)^2 / (r^6 h) + 5H_0 \quad (2)$$

где  $\mu$  - величина магнитного момента примесного центра;  $\theta$  - угол между осью, соединяющей данные центры и направлением постоянного магнитного поля;  $r$  - расстояние между центрами;  $\Delta H_0$  - собственная ширина линии в отсутствие рассматриваемого уширения.

Из выражения (2) видно, что определяющими являются время  $T_1$  примесного центра, топология расположения центров и расстояние между ними. Обращает на себя внимание существенная зависимость от последнего (в случае взаимодействия одинаковых ПМЦ:  $\Delta H_0 \sim 1/\Gamma^3$  [2]).

В данной модели рассматривается случай однородного распределения углеродных примесных ПМЦ. В качестве исходной формы линии углеродных центров использовалась лоренцева форма, нормированный вид производной которой записывается в виде [3].

$$Y' = \frac{5H_0 L}{2} \frac{2(H-H_0)}{[(H-H_0)^2 + (6H_0)^2]^2} \quad (3)$$

где  $H$  - значение приложенного постоянного магнитного поля,  $H_0$  - резонансное значение постоянного магнитного поля.

В качестве примесного центра рассматривалась молекула кислорода. В реальных условиях концентрация примесных центров меньше углеродных. Поэтому можно считать, что каждая молекула кислорода взаимодействует только со своей областью, границами которой являются внутренняя и внешняя сферы с радиусами  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2 = (3/47 \ln k)^{1/3}$  соответственно, где  $\Gamma_1$  - радиус молекул кислорода,  $k$  - концентрация последних. Как известно, элемент объема  $dV = \sin \theta r^2 dr d\theta d\phi$ , где  $\theta$  - полярный угол. Количество ПМЦ, находящихся в данном объеме равно

$$dN = n r^2 \sin \theta dr d\theta d\phi \quad (4)$$

где  $n$  - концентрация углеродных ПМЦ.

Используя выражения (2)-(4), форму производной сигнала поглощения ЭПР, обусловленную одним элементом объема, запишем в виде:

$$dY' = \frac{5H_0 + (c/r^6)(1 - \cos^2 \theta) \sin^2 \theta}{(H-H_0)^2 + (8H_0 + (c/r^6)(1 - \cos^2 \theta)^2)^2} \quad (5)$$

где  $c = g \mu_B n^2 / h$ .

Нормированная форма линии производной сигнала поглощения ЭПР углеродного шестства  $Y'$  обусловленная действием одной парамагнитной молекулы кислорода (или другого центра с коротким временем релаксации), имеет вид

$$Y' = \frac{45H(H-H_0)r^2 \sin^2 \theta}{\Gamma^2 [(H-H_0)^2 + 6H^2]^2}, \quad (6)$$

где  $6H = 5H_1 + 5H_0$  - итоговая ширина спин-пакета.

Для получения формы спектральной линии была составлена программа на языке Паскаль с использованием метода Симпсона[4] для вычисления интеграла. Главный результат моделирования состоит в том, что, в согласии с экспериментом, доказано существенное влияние парамагнитных молекул кислорода как центров с короткими временами релаксации на спектр ЭПР углеродных материалов и возможность формирования линии нового типа-суперлоренцевой формы.

Предложенный подход позволяет количественно объяснить факт существенного уменьшения регистрируемой интегральной интенсивности и изменения формы линии спектра ЭПР образцов при измерении в кислородной атмосфере по сравнению с вакуумом[2,5,6]. Такое обратимое изменение сигнала углеродных ПМЦ при практическом сохранении расстояния между пиками связано с формированием суперлоренцевой формы линии. Загадочным представлялось "гашение" одной молекулой Ог нескольких десятков углеродных ПМЦ[7]. На наш взгляд, оно может быть объяснено с помощью "эстафетного" механизма: молекула Ог укорачивает время релаксации ближайших к ней углеродных ПМЦ, которые в свою очередь подобным же образом воздействуют на соседние центры и т.д.

Раскрытие природы "кислородного эффекта" подтверждает перспективность метода ЭПР-спектроскопии для исследования низкоразмерных элементов фуллереноподобных структур, их сорбционных свойств, а также обеспечивает возможность создания принципиально новых датчиков кислорода.

### Список литературы

1. Redfield A.G. // IBM J. Res. Develop. 1957. P. 19-31.
  2. ИнгрэмД. Электронный парамагнитный резонанс в биологии. Москва. 1972.
  3. Пул Ч. Техника ЭПР-спектроскопии. Москва. 1970.
  4. Мизрохи С.В. Turbo-Pascal и объектно-ориентированное программирование. Москва. 1992.
  - 5- Бах Н.А., Ванников А.В., Гришина А.Д. Электропроводность и парамагнетизм полимерных полупроводников. Москва. 1971.
    - Алексеев Б.Ф., Бслэногов А.М., Богачёв Ю.В. и др. Магнитный резонанс при изучении природных образований. Ленинград. 1987.
  - 7\* Mr<sup>o</sup>zowsky S. // Carbon, 6 .1968. P. 1364-1367.
    - Лебедев Я.С., Муромцев В.И.. ЭПР и релаксация стабилизированных радикалов. Москва. 1972.
- Блюменфельд Л.А., Воеводский В.В., Семёнов А.Г. Применение электронного парамагнитного резонанса в химии. Новосибирск. 1962.

## МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИМЕРАМИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ ПЛОСКИХ БИСЛОЙНЫХ ЛИПИДНЫХ МЕМБРАН

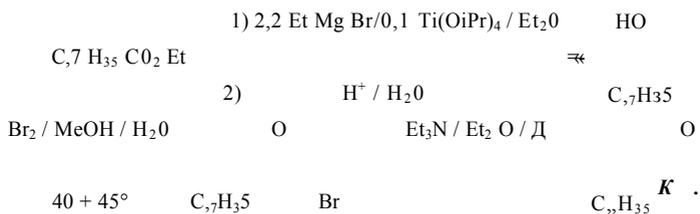
Зайцев М.А., Лобан В.А., Эпштейн О.Л., Хмельницкий А.И.,  
Куликович О.Г., Черенкевич С.Н.

Белорусский государственный университет

Биологические мембраны, характеризующиеся толщиной в несколько нанометров, представляют собой полифункциональные структуры, обеспечивающие рецепцию и преобразование информационного сигнала в живых системах. Высокая селективность, возможность параметрического управления функциональным состоянием мембранных структур являются чрезвычайно привлекательными для разработки элементов молекулярной электроники. Плоские бислойные липидные мембраны (ПБЛМ) позволяют эффективно моделировать транспортные процессы, изучать пути модификации процесса переноса заряда мембраноактивными соединениями. Немодифицированные ПБЛМ характеризуются высоким электрическим сопротивлением ( $\sim 10^9$  Ом). Существуют химические вещества, способные изменять ионную проницаемость ПБЛМ [1]. Перспективными модификаторами ионной проницаемости мембран являются соединения на основе N-изопропилакриламида, характеризующиеся изменением структурного состояния при изменении температуры [2].

В работе предлагается новый метод термоуправляемой модификации ионной проводимости ПБЛМ.

В качестве термочувствительного модификатора использованы производные N-изопропилакриламида. Сополимеры N-изопропилакриламида с n-гептадецилвинилкетонем по следующей методике. Прежде всего проводили синтез n-гептадецилвинилкетона по схеме:



1-n-гептадецилциклопропанол был получен из этилстеарата действием 2,2 эквивалентов этилмагнийбромида в эфире в присутствии 0,1 эквивалента тетраизопропоксититана с последующей обработкой водной кислотой с выходом 95%. Раскрытием трехчленного цикла бромом в водном метаноле при температуре  $40 + 45^\circ\text{C}$  с выходом 85% был получен n-

. сптадеиил-**P-бромэтилкетон**, из которого действием триэтиламина в диэтиловом эфире при кипячении с выходом 85% был получен *n*-гептадецилвинилкетон.

Сополимеризацию *N*-изопропилакриламида с *n*-гептадецилвинилкетонем проводили свободнорадикальной полимеризацией в тетрагидрофуране в течение 24 часов при температуре  $50 \pm \text{ГС}$ . В качестве инициатора использовали азобисизобутиронитрил (0,3 mol%).

Выделение и очистку сополимеров проводили переосаждением из тетрагидрофурана в диэтиловый эфир или из тетрагидрофурана в *n*-гексан. Анализ количественного состава сополимеров проводили методом протонного магнитного резонанса на ЯМР-спектрометре Brucker- 200АС.

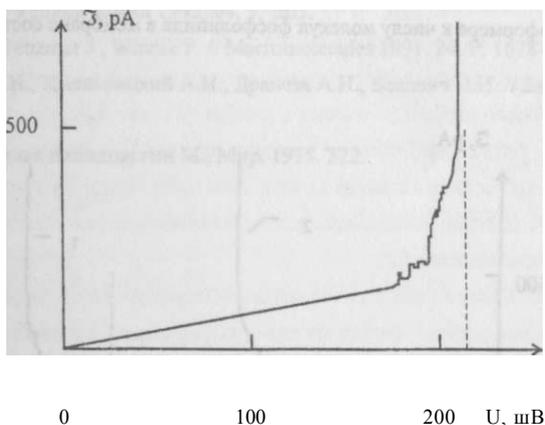


Рис. 1. Типичная ВАХ модифицированных ПБЛМ

Для изучения электрической проводимости ПБЛМ и анализа каналов проводимости немодифицированных и модифицированных сополимерами мембран разработаны и изготовлены измерительный модуль и ячейка [3]. Измерительный модуль состоит из генератора линейно-нарастающего напряжения (ГЛН), аналоговых коммутаторов, измерительного узла, 2-х повторителей напряжения, дифференциального усилителя, внешнего иммитатора мембраны. Сигнал с ГЛН через аналоговые коммутаторы поступает на измерительный узел, который собран по схеме автоматической фиксации потенциала. Сигнал одного из выходов измерительного узла через аналоговые коммутаторы поступает на внешний иммитатор или к Датчику. В измерительном модуле предусмотрены плавное и дискретное регулирование скорости развертки, цифровая и аналоговая индикация режимов исходных параметров и контроля их изменений, регистрацию которых проводили с помощью вольтметра типа "21, самописца и осциллографа С8-13.

Измерительная ячейка изготовлена из тефлона и имеет две камеры, соединенные отверстием диаметром 1 мм. Обе камеры заполняются водным раствором 0,15 н NaCl. Для измерения электрической проводимости использовали два платиновых электрода, для уменьшения поляризации электроды были почернены стандартным способом в платиноводородной кислоте. Ячейка помещена в термостат с рабочим диапазоном температур от 20 до 50°C. Выделение липидов проводили по известной методике[4]. Мембраны формировали из смеси фосфолипид:холестерин в соотношении 2:1 в нонане. Формирование бислоя контролировали с помощью микроскопа МБС-2 по исчезновению колец Ньютона и по прекращению изменения со временем электрической проводимости, определяемой по методу фиксации потенциала с помощью измерительного модуля. Производные N-изопропилакриламида растворяли до определенной концентрации в спиртовом растворе липида. Соотношение числа молекул каналоформера к числу молекул фосфолипида в мембране составляло 1:200.

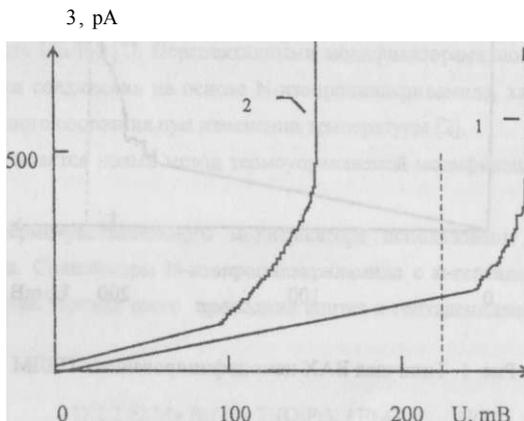


Рис. 2. ВАХ модифицированных ПБЛМ ( каналоформер: фосфолипид 1: 200)  
1 - температура 30°C; 2 - температура 45°C

Проведено исследование электрических свойств ПБЛМ, модифицированных производными N-изопропилакриламида в диапазоне температур от 20 до 50°C. На Рис. 1 и 2 приведены вольт-амперные характеристики (ВАХ) немодифицированных и модифицированных мембран. В области низких напряжений (до 60 мВ) вольт-амперные характеристики немодифицированных и модифицированных мембран практически не различаются. Изменение температуры не приводит к существенному изменению характеристик немодифицированных ПБЛМ. При температурах ниже 34 °C модификатор приводит к некоторому увеличению токивости ПБЛМ (напряжение пробоя возрастает до 250 мВ), но не изменяет эффект

**ность переноса** ионов через мембрану. Для модифицированных мембран наблюдается изменение проводимости мембран в диапазоне температур от 34 до 40°C. При температурах **выше 40°C** вид ВАХ свидетельствует об открытии ионных каналов в мембране, результатом **чего является** резкое увеличение количества заряда, переносимого через мембрану.

Итак, разработан метод синтеза сополимеров N-изопропил-акриламида с н-гептадецилвинилкетонем и методика очистки полученных сополимеров. Показано, что производные N-изопропилакриламида модифицируют электрическую проводимость ПБЛМ в диапазоне температур 30 - 45 °С.

#### Список литературы

1. **Галаев И.Ю.** // Успехи химии 1995. 64. 5. 505.
2. RingsdorfH., VenzmerJ., Winnik F.//Macromolecules 1991. 24. P. 1678-1686.
3. **Черенкевич С.Н., Хмельницкий А.И., Драпеза А.И., Бакевич И.И.** // Биофизика 1989. Т. 34. N 1.С. 45-48.
4. **Кейтс М.** Техника липидологии М., Мир. 1975. 322.

# МЕХАНИЗМЫ СТРУКТУРНОЗАВИСИМОЙ РЕГУЛЯЦИИ ФОТОХИМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ ПИГМЕНТОВ В УНИЛАМЕЛЛЯРНЫХ ЛИПИДНЫХ ВЕЗИКУЛАХ

Зорина Т.Е., Михаловский И.С., Зорин В.П.

Белорусский государственный университет

Включение тетрапиррольных пигментов в матрицу липидного бислоя позволяет изучать структуры, сочетающие уникальные фотофизические свойства порфиринов и высокую структурную организацию мембран. Зависимость характеристик структуры мембраны от липидного состава, температуры и других параметров среды обуславливает возможность модификации фотофизических и фотохимических характеристик подобных материалов в результате изменения макрохарактеристик липидной матрицы. Исследование механизмов подобной регуляции представляет значительный интерес для понимания процессов, связанных с фотоиндуцированным переносом зарядов в мембранных системах при работе фотосинтетических систем [1]. Актуальным является изучение комплексов порфиринов с липидными мемеллами в связи с попытками создания на их основе новых фотосенсибилизаторов для целенаправленной фотодинамической терапии, обладающих высокой селективностью биораспределения и терапевтической эффективностью [2].

Целью данной работы явилось исследование структурной организации и фотофизических свойств униламеллярных липидных везикул, содержащих в своем составе ряд тетрапиррольных пигментов. Малые униламеллярные везикулы (МУВ), средний диаметр 45-50 нм, готовили методом инъекций с использованием синтетических фосфатидилхолинов согласно описанной ранее схеме [3]. Пигменты (производные хлорофилла *a*, Zn-фталонианин) вводили в раствор липида до приготовления везикул. Контроль за распределением пигментов между мембранной и водной фазами, а также за степенью агрегации молекул пигмента в липидном бислое осуществляли с использованием техники флуоресцентного анализа.

**Влияние фазового состояния бислоя на фотосенсибилизирующую активность порфиринов в составе МУВ.** Исследовали изменение скорости сенсибилизированного порфирином фотоокисления дифенилизобензофурана (ДФИБФ) в суспензии МУВ при варьировании температуры среды. ДФИБФ, неполярный акцептор синглетного кислорода, практически полностью локализуется в углеводородной фазе липидной мембраны. Фотооблучение суспензии везикул, содержащих порфириновые сенсибилизаторы, ведет к окислению ДФИБФ. Константа скорости окисления ДФИБФ в липидном бислое в квазикристаллическом состоянии изменяется незначительно с ростом температуры. При достижении температуры критического значения, соответствующего точке перехода геле-жидкий кристалл, процесс фотоокисления ДФИБФ значительно ускоряется (Рис. 1).

О влиянии фазового состояния липидного бислоя на фотосенсибилизирующие свойства комплексов МУВ с порфиринами свидетельствуют также результаты исследования фотогемолитической активности данных структур (Рис.2). Облучение видимым светом суспензии эритроцитов в присутствии МУВ, нагруженных фотосенсибилизаторами, индуцирует процесс повреждения клеток. Скорость этого процесса увеличивается с ростом температуры, однако в области фазового превращения липидного бислоя наблюдается разрыв данной зависимости. Переход липидной мембраны из квазикристаллического в жидкокристаллическое состояние сопровождается значительным снижением эффективности сенсibilизации фотоповреждения эритроцитов.

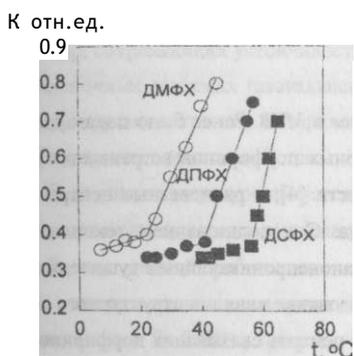


Рис. 1. Зависимость относительной скорости фотоокисления ДФИБФ в суспензии МУВ из димиристоил- (ДМФХ), дипальмитоил- (ДПФХ) и дистеароилфосфатидилохолина (ДСФХ), окрашенных  $Zn$ -фталоцианином (1:100), от температуры среды.

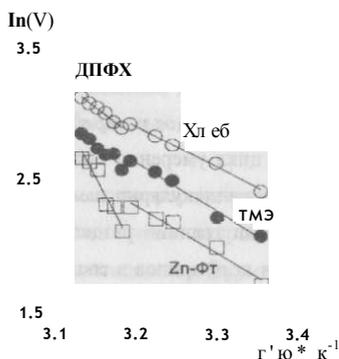


Рис. 2. Зависимость скорости фотосенсибилизированного гемолиза эритроцитов (V) при инкубации их в суспензии МУВ, окрашенных хлорином еб, триметилловым эфиром хлорина еб,  $Zn$ -фталоцианином, от температуры среды.

Установленные эффекты, по-видимому, не связаны с изменением собственных фотопфизических свойств порфиринов в составе везикул. Так как изменение фазового состояния бислоя влияет лишь незначительно на время жизни и квантовый выход триплетного и синглетного возбужденных состояний пигмента, величину квантового выхода генерации синглетного кислорода, можно предположить, что вариации скорости фотохимических процессов в мембранах отражают структурозависимые изменения молекулярной подвижности ДФИБФ, пигмента, синглетного кислорода в липидном бислое.

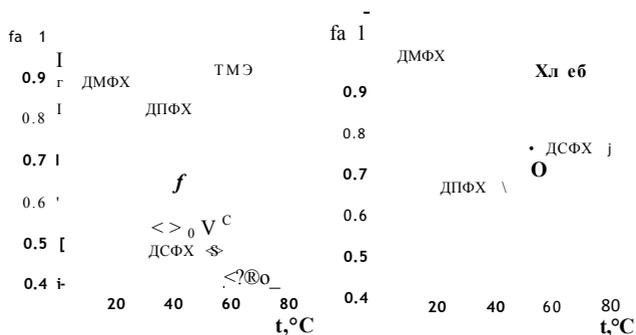


Рис.3. Зависимость доли молекул порфирина в суспензии МУВ из различных липидов, доступных непроницаемому тушителю антрахинондисульфату от температуры среды.

**Внутримембранное распределение порфиринов в МУВ.** Ранее было показано, что тетрапиррольный цикл умеренно полярных и неполярных порфиринов встраивается в липидный бислой перпендикулярно ламеллярной плоскости [4], равновесные центры сорбции располагаются на границе раздела мембрана-среда. С использованием техники тушения флуоресценции порфиринов в составе МУВ мембранонепроницаемыми тушителями, а также методов спектрального анализа проведено исследование влияния структурного состояния липидной мембраны на равновесное распределение центров связывания порфиринов в МУВ (Рис.3). Из полученных результатов следует, что связанные молекулы порфиринов неравномерно распределены между внешним и внутренним липидными монослоями. При температуре ниже точки фазового перехода большая часть встроенных молекул порфирина локализуется на внешней поверхности везикулы. Структурные превращения везикул, связанные с фазовым переходом, сопровождаются перераспределением значительной части молекул пигмента, при этом изменение степени заселенности внешнего и внутреннего монослоя мембраны зависит как от типа МУВ, так и от особенностей химической структуры пигмента.

#### Список литературы

1. Topicss in Current Chemistry. Photoinduced Electron Transfer III. Ed.Board: Dewar J.S., Duni-J.D.et.al.// Springer-Verlag, Berlin, 1991.
2. Ricchelli F., Jori G., et.al.//Biochem. Biophys. Acta. 1991. V.1065.P.42.
3. Зорин В.П., Михаловский И.С. и др. //Биофизика. 1995. Т.40. С.328.
4. Зорин В.П., Зорина Т.Е. и др. //Биофизика. 1989. Т.34. С.33.

## НАКОПЛЕНИЕ ИМПЛАНТИРОВАННОГО АРГОНА В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ И ФОРМИРОВАНИЕ ПОРОВЫХ СИСТЕМ

Драко В.М., Углов В.В., Ходасевич В.В.

Белорусский государственный университет

Одним из направлений поиска методов контроля и стабилизации субмикронных структур является создание диффузионных барьеров в виде слоев оксидных или других устойчивых химических соединений, аморфных слоев. В качестве альтернативы может быть предложено формирование на межфазных границах барьера в виде слоя газовакансионны\* пор, сохраняющих устойчивость до достаточно высоких температур. В металлических тонкопленочных системах газовакансионные поровые ансамбли могут стабилизировать фазово-структурное состояние материала, существенно влиять на его магнитные, электрические, физико-химические свойства.

В научной литературе имеются публикации, в которых рассматривается формирование газовакансионных пор в металлах, имплантированных ионами инертных газов [1,2].

Задача данной работы состоит в разработке методологии формирования поровых систем в металлических пленочных материалах. Для нанесения металлических пленок использован сплав Fe-30%Ni, который отличается высокой коррозионной стойкостью, имеет уникальные физические, в частности, магнитные свойства, обладает гетерофазной структурой и является интересным объектом для изучения закономерностей порообразования и влияния поровых систем на физические свойства.

Слои сплава Fe-30%Ni толщиной 60...100 нм осаждались методом электронно-лучевого испарения в вакууме на установке ВУ-1А, на холодную или подогреваемую до 300°C подложку. В качестве подложки использовались свежие сколы монокристаллов хлорида натрия, полированное кварцевое стекло, кристаллы кремния, бериллиевая фольга. Контроль элементного состава проводили на установке резерфордовского обратного рассеяния с использованием пучка ионов  $He^+$  с энергией 2 МэВ. Структура пленок исследовалась методом просвечивающей электронной микроскопии на микроскопе JEM-100CX. Пленки облучались ионами  $Ag^+$  с энергией 40 кэВ при плотности тока 1,5...2 мкА/см<sup>2</sup> флюэнсами в интервале  $0,5 \cdot 10^{16}$ ... $10 \cdot 10^{16}$  см<sup>-2</sup>. Особое внимание на методическом этапе работы было уделено контролю накопления аргона в металлических пленках. Замечено, что при больших дозах имплантации содержание аргона не соответствует дозе. В то же время в данной работе важно знать, какую предельную концентрацию аргона можно получить при имплантации и какова основная причина ограничения накопления аргона.

анализ спектров обратного резерфордовского рассеяния позволил выяснить закономерность накопления аргона в мишенях. В Таблице 1 содержатся данные по слоевому содержанию аргона. Как видно, накопление аргона достигает предела при флюэнсах свыше  $0,5 \cdot 10^{16}$  см<sup>-2</sup>.

Таблица 1.

Содержание аргона в образцах при разных дозах облучения

Флюэнс, Ю <sup>17</sup> см <sup>2</sup>	0,1	0,5	1,0
Слоевая концентрация аргона, 10 <sup>17</sup> см <sup>2</sup>	0,09	0,4	0,5

Вероятной причиной ограничения концентрации аргона является распыление. Были выполнены расчеты профиля распределения имплантированных ионов аргона с учетом распыления. Коэффициент распыления железа ионами Ag<sup>+</sup> с энергией 40 кэВ рассчитан по Зигмунду [3] и составил 3,4 ат/ион. Профиль аргона в железе без учета распыления брался на основе таблиц [4].

В Таблице 2 представлены данные по рассчитанной слоевой концентрации аргона с учетом распыления в зависимости от дозы имплантации.

Таблица 2.

Слоевые концентрации аргона в железе, рассчитанные с учетом распыления

Флюэнс, 10 <sup>17</sup> см <sup>2</sup>	0,1	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2
Слоевая концентрация аргона, 10 <sup>17</sup> см <sup>2</sup>	0,09	0,19	0,34	0,45	0,49	0,50	0,50

Характер расчетной зависимости накопления аргона от флюэнса вполне удовлетворительно совпадает с экспериментальной. Как видно, предельная слоевая концентрация аргона не превышает 0,5·10<sup>17</sup> см<sup>2</sup>.

Несколько расходятся экспериментальные и расчетные значения объемной концентрации аргона. В области максимума предельного концентрационного профиля вблизи поверхности мишени расчетная концентрация составляет около 2,4·Ю<sup>22</sup> см<sup>3</sup>, тогда как экспериментальное значение - 0,9·10<sup>22</sup> см<sup>3</sup>. В то же время распределение аргона по глубине мишени, соответственно, в 2...3 раза шире, чем по расчету. Возможно, высокие напряжения, возникающие при пересыщении решетки железа аргоном, уже при температуре облучения (вблизи комнатной) вытесняют аргон из кристаллитов в область межзеренных границ, по которым он распространяется вглубь образцов.

Электронно-микроскопические исследования пленок сплава Fe-30%Ni проведены на неимплантированных образцах и имплантированных флюэнсом 0,5·Ю<sup>17</sup> см<sup>2</sup>. У неимплантированных образцов наблюдалась мелкодисперсная структура с весьма несовершенными границами зерен. Размер зерен можно оценить в пределах 50...120 нм. После имплантации метиого укрупнения зерен не наблюдалось, однако контраст изображения усилился, что зывает на определенное совершенствование структуры. Электронная дифракция пока

наличие в пленках преимущественно  $\gamma$ -фазы, а также присутствие некоторого количества  $\alpha$ -фазы. После имплантации на микродифракционной картине появляются кольца, принадлежащие упорядоченной фазе  $\text{Fe}_3\text{Ni}$ .

После отжига в вакууме имплантированных ионами аргона пленок при температуре  $800^\circ\text{C}$  в течение 1 часа зерна укрупнились до 150...200 нм, границы зерен стали четкими, зерна приобрели более правильную форму. Площадь границ зерен существенно уменьшилась (в десятки раз). На границах зерен, особенно на тройных границах, сформировались газовые поры. Размеры пор лежат в широких пределах. Наиболее типичный размер 30...40 нм.

До отжига газовая пористость не наблюдалась. Возможно, это связано с развитостью межзеренных границ, которые способны поглотить, адсорбировать значительное количество аргона. В процессе отжига площадь границ резко сокращается, а освободившийся аргон формирует поры параллельно с рекристаллизацией пленки.

Таким образом, в результате проделанной работы показано, что в пленках железоникелевого сплава с помощью ионной имплантации можно создать концентрацию аргона, достигающую  $10^{19}\text{см}^{-3}$  при слоевом содержании  $0,5\text{-}10^{19}\text{см}^{-2}$ . Отжиг пленок приводит к формированию поровых систем, локализованных преимущественно на границах зерен.

### Список литературы

1. Шаповалов В.И. Тимченко А.Г. // Физ. мет. и металлвед. 1993. 76. N 3. С.141-144.
2. Nandedkar A.S., Srinivasan G.R. и др. // Phil. Mag. A. 1993. V. 67. N 2. P.391-406.
3. Распыление твердых тел ионной бомбардировкой. Под ред. Р.Бериша. М.: Мир. 1984.
4. Пространственные распределения энергии, выделенной в каскаде атомных столкновений в твердых телах. М.: Энергоатомиздат. 1985. С. 248.

## ХАОТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕКОМБИНАЦИОННО-АКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ В ОСОБО ЧИСТОМ ГЕРМАНИИ

<

**Явид В.Ю., Якубеня С.Н., Петров В.В., Шамас Х.А., Харченко Т.Д.**

Белорусский государственный университет

Определяющую роль в формировании ансамбля рекомбинационных центров в особо чистом германии (ОЧГ) играют примесные комплексы, связанные с атомами меди и водорода [1].

В работе исследовались профили радиального распределения времени жизни неравновесных носителей заряда ( $\tau$ ). Измерения проводились на кристаллах ОЧГ р-типа проводимости с концентрацией носителей заряда при 77 К  $Ю^{10} + 10^{11} \text{ см}^{-3}$ , выращенных методом Чохральского из кварцевого тигля в атмосфере водорода. Плотность дислокаций составляла  $(1+3) \cdot 10^3 \text{ см}^{-2}$ . Величина времени жизни для различных слитков находилась в диапазоне 920 - 1150 мкс при комнатной температуре. Значение  $\tau$  определялось методом фазового детектирования сигнала фотопроводимости. Распределение  $\tau$  при комнатной температуре записывалось на самописец.

На Рис.1 приведены профили радиальных зависимостей времени жизни для двух пластин ОЧГ, вырезанных из различных слитков. Кривые 1 и 2 на Рис.1 принадлежат зависимостям  $\tau = f(r)$ , измеряемым в направлениях перпендикулярных друг другу на одной и той же пластине. Из Рис. 1. видно, что распределения  $\tau$  представляют собой сильно отличающиеся друг от друга зависимости.

С целью выявления скрытых периодичностей в распределении времени жизни неравновесных носителей заряда по диаметру слитка и определения их размеров был реализован классический аппарат спектрального анализа, использующий быстрое преобразование Фурье. На Рис. 2 приведены амплитудные спектры Фурье для тех же образцов, что и на Рис. 1. Анализ спектров для всех исследовавшихся образцов позволил выделить две серии линий. Первая состоит из двух линий с существенно различными волновыми числами  $k_1$  и  $k_2$  и их суперпозиции  $k_1+k_2$  и  $|k_1-k_2$ . Для линий второй серии характерно соотношение волновых чисел либо  $k_1, 3/4k_1, 1/2k_1$  и  $1/4k_1$  (Рис. 2, кривые 1 и 2) либо  $k_1, 1/2k_1$  (Рис. 2, кривая 3). Таким образом, все многообразие различных квазипериодических радиальных распределений  $\tau$  (а, следовательно, и концентрации рекомбинационных центров) может быть описано с помощью двух периодических функций с существенно различными волновыми числами, их суперпозицией и субгармониками одной из них. Это означает, что распределение рекомбинационных центров вдоль поверхности раздела расплав-кристалл формируется под воздействием по крайней мере двух различных процессов.

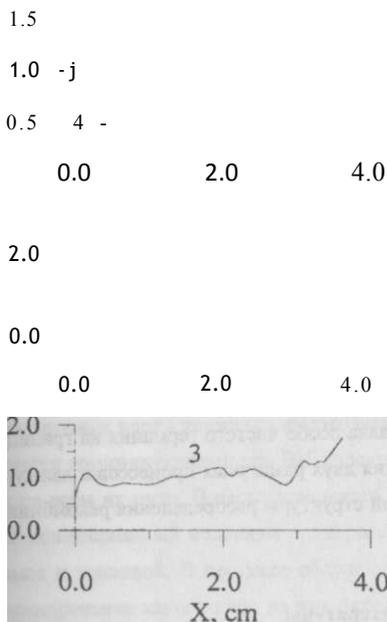


Рис. 1

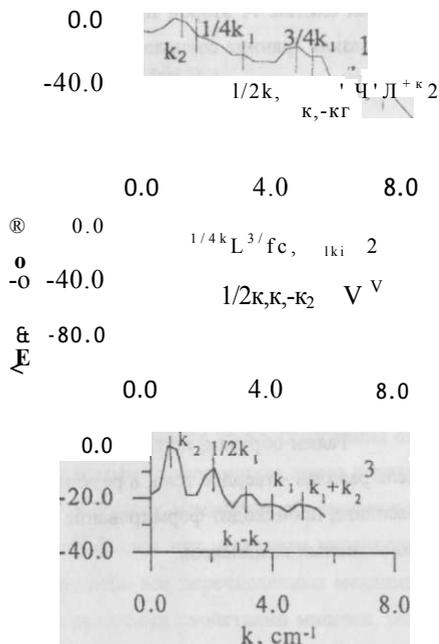


Рис.2

Колебания температуры в расплаве вызывают осцилляции скорости роста кристалла, а следовательно, и эффективного коэффициента сегрегации. При выращивании кристаллов по методу Чохральского оба эти процесса связаны с гравитационной конвекцией в расплаве. Конвективная неустойчивость расплава, приводящая к формированию пространственно-временной структуры у фронта кристаллизации, обычно развивается по сценарию Фейгенбаума через бифуркации удвоения периода [2]. Бифуркации возникают при определенном значении числа Релея [2], т.е. конфигурации системы, в которой выращивается кристалл. Развитие "дерева бифуркаций" ведет к турбулентности [3]. Этот переход в настоящее время в основном изучен по временной динамике конвективных потоков. Но турбулентность не может быть описана только временной динамикой. Пространственная и временная последовательность бифуркаций скорее всего зацеплены друг с другом. Однако то, как это происходит, остается пока неясным [3].

Одна из серий линий в амплитудном спектре Фурье на Рис. 2 как раз и описывает переход к турбулентности посредством последовательности бифуркаций.

Другой механизм образования поперечных неоднородностей с периодом распределения рекомбинационных центров  $\sim 1$  см может быть обязан двум различным процессам [2]. Первый из них обусловлен асимметрией теплового поля у фронта кристаллизации вращаю-

шегося слитка. А второй предполагает большие скорости бокового роста, например, если межфазная граница совпадает с кристаллографической плоскостью с низким индексом. Это случай роста кристалла на гладкой межфазной поверхности (так называемой грани).

Одинаковый характер спектров Фурье зависимостей  $t = f(x)$ , снятых на одной и той же пластине, но в двух взаимно перпендикулярных направлениях (кривые 1 и 2 на Рис. 2) указывает на то, что хаотическое распределение рекомбинационных центров имеет четко выраженную, правильную периодическую структуру. Примером такой структуры может являться концентрическое или спиральное распределение хорошо изученных в настоящее время свирл-дефектов в кремнии. Значения  $k_1$  и  $k_2$  заметно изменяются от кристалла к кристаллу и зависят также от выбора направления измерения  $t$  по пластине. Тем не менее, для всех исследованных кристаллов данные волновые числа лежат в определенных интервалах:  $k_1 = (3.8-6.5) \text{ см}^{-1}$  и  $k_2 = (0.75-1.25) \text{ см}^{-1}$ .

Таким образом, при выращивании кристалла особо чистого германия на границе раздела расплав - твердое тело, в результате развития двух различных процессов в движущемся расплаве, происходит формирование хаотической структуры распределения рекомбинационно-активных комплексов.

### Список литературы

1. Глорнизова Р.И., Колесник Л.И. // ФТП 1993. Т. 27. Вып. 4. С. 545.
2. Мюллер Г. // Выращивание кристаллов из расплава. Конвекция и неоднородности. М Мир. 1991.
3. Заславский Г.М., Сагдеев Р.З. // Введение в нелинейную физику. От маятника до турбулентности и хаоса. М.: Наука. 1988. Гл.11.

## ТРЕКООБРАЗОВАНИЕ В АЛМАЗЕ И КРЕМНИИ, ОБЛУЧЕННЫХ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

**Вариченко В.С., Зайцев А.М., Мартинович В.А.,**

**Русецкий М.С., Ленина Н.М.**

Белорусский государственный университет

Необходимость развития метода высокоэнергетичной ионной имплантации (ВИИ) (энергия ионов более 1 МэВ/а.е.м.) определяется потребностью создания эффективных способов изготовления новых типов электронных приборов, максимально использующих объем активного элемента [1].

Одной из основных особенностей ВИИ является трекообразование в облучаемом материале [2]. Треки представляют собой специфические протяженные одномерные дефекты, формируемые вдоль движения высокоэнергетичных ионов. Процесс трекообразования определяется доминирующими при ВИИ электронными потерями тормозящихся ионов практически на всем их пути. В настоящее время известны 3 основных механизма образования треков: ионизационный механизм подпорогового дефектообразования, механизм кулоновского взрыва и тепловой. В процессе облучения проявляют себя все перечисленные механизмы. Доминирование какого-либо из них определяется физическими свойствами мишени, основными из которых являются электро- и теплопроводность. Таким образом, вследствие различия физических параметров алмаза и кремния следует ожидать, что процессы формирования и свойства треков в этих материалах при ВИИ будут отличаться.

Исследование методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) поверхности синтетического алмаза, облученного ионами Кг с энергией 210 МэВ и Аг с энергией 46 МэВ, показало, что поверхность изменяет свой рельеф и после облучения покрыта кратерообразными образованиями (Рис.1). Диаметры этих кратеров составляют величину в пределах от 3 до 20 мкм и обуславливаются или одиночными ионными треками, или перекрывшимися несколькими треками. Наблюдавшееся неоднородное распределение треков по поверхности образца объясняется неоднородностью легирования бором алмаза, то есть присутствием на облученной поверхности областей, имеющих различную электропроводность.

Исследования методом ЭПР образцов алмаза, имплантированных ионами Ni с энергией 335 МэВ в интервале доз  $5 \times 10^{12}$  -  $5 \times 10^{14}$  см<sup>-2</sup>, показали, что такое облучение приводит к формированию сложной дефектной области, состоящей из точечных дефектов и одномерных упорядоченных нететраэдрических элементов - треков, резонансное поглощение в которых обусловлено волнами спиновой плотности солитонного типа. На основании данных, полученных при термическом отжиге, был сделан вывод, что образующиеся точечные дефекты являются, в основном, дефектами междоузельного типа.

Дозовая зависимость интенсивности линии ЭПР доминирующих парамагнитных центров (ПЦ), обусловленных сформированными ВИИ одномерными элементами, является сублинейной в интересе доз  $5 \times 10^{12}$  -  $5 \times 10^{13}$   $\text{см}^2$  и суперлинейной в интервале  $5 \times 10^{13}$  -  $5 \times 10^{14}$   $\text{см}^2$ . В то же время степень асимметрии линии ЭПР существенно возрастает на первом участке исследованного интервала, а затем уменьшается на втором, приводя к практически симметричной линии, что объясняется перекрытием треков при дозе  $5 \times 10^{14}$   $\text{см}^2$  и образованием объемной структуры из одномерных элементов. Значение дозы  $5 \times 10^{14}$   $\text{см}^2$  позволяет оценить эффективный диаметр трека как равный 0.9 нм.

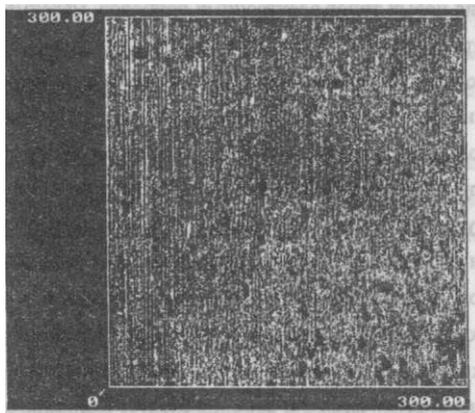


Рис.1. АСМ изображение участка поверхности синтетического алмаза ( $300 \times 300 \text{ нм}^2$ ), облученного ионами Кг с энергией 210 МэВ и дозой  $10^{12} \text{ см}^2$ .

Анализ поведения параметров линии ЭПР при отжиге алмаза, облученного ионами Ni с энергией 335 МэВ и дозой  $5 \times 10^{14}$   $\text{см}^2$ , показал, что сформированные одномерные структуры являются термически стабильными. Так, в интервале температур 600-800°C происходит резкое уменьшение интенсивности линии, что указывает на структурные преобразования, происходящие в кристаллической решетке алмаза. В интервале 800-1400°C концентрация изотоженных структур сохраняется практически без изменения и составляет 5.2% от первоначальной.

Исследования методом ЭПР образцов кремния, имплантированных ионами Ni (335 МэВ,  $5 \times 10^{12}$  -  $5 \times 10^{14}$   $\text{см}^2$ ) и Хе (5.68 ГэВ,  $5 \times 10^{11}$   $\text{см}^2$  -  $5 \times 10^{13}$   $\text{см}^2$ ), показали, что облучение приводит к формированию ряда точечных дефектов (Si-P3, Si-P6, Si-S2 и др.). Высокая концентрация точечных дефектов обуславливает регистрацию в спектрах  $\xi$ -линии с g-факторС  $2.0058 \pm 0.0002$ . Отсутствие сигнала, характерного для ПЦ областей аморфизации, может быть связано с увеличением скорости рекомбинации первичной дефектной структуры, что, вер<sup>0</sup>

ятно, стимулируется высоким уровнем ионизации решетки вследствие электронного торможения ионов.

В ходе выполнения данной работы были получены дозовые зависимости концентрации ПЦ точечных дефектов, созданных облучением ионами Ni с энергией 335 МэВ и ионами Хе с энергией 5.68 ГэВ. В первом интервале доз  $5 \times 10^{12}$  -  $5 \times 10^{13}$  см<sup>12</sup>(Ni) и  $5 \times 10^{11}$  -  $5 \times 10^{12}$  см<sup>12</sup> (Хе) наблюдается сублинейная зависимость, что свидетельствует о постепенном накоплении точечных дефектов и их рекомбинации в процессе облучения в пределах треков отдельных ионов. При этих дозах треки отдельных ионов еще не перекрываются и находятся на расстоянии, не позволяющем аннигилировать дефектам из различных треков. Уменьшение наклона этой зависимости в интервале больших доз  $5 \times 10^{13}$  -  $5 \times 10^{14}$  (Ni) и  $5 \times 10^{12}$  -  $5 \times 10^{13}$  см<sup>12</sup> (Хе) происходит вследствие уменьшения скорости накопления дефектов, что определяется рекомбинационным взаимодействием дефектов, принадлежащих соседним трекам, вследствие их перекрытия.

Таким образом, в результате проведенных исследований установлено, что высокоэнергетичное ионное облучение приводит к формированию в решетке как алмаза, так и кремния протяженных дефектных областей - треков. Показано, что в алмазе треки представляют собой одномерные низкоразмерные упорядоченные нететраэдрические элементы, обладающие специфическими физическими свойствами. Для установления структуры треков высокоэнергетичных ионов в кремнии требуется проведение дополнительных исследований.

#### Список литературы

- [1]. Ziegler J.F. High Energy Ion Implantation. // Nucl. Instrum. and Meth. 1985. Vol. B6. P. 270-282.
- [2]. Флейшер Р.Л., Прайс П.Б., Уокер П.М. Треки заряженных частиц в твердых телах. Принципы и приложения. 4.1. М. Энергоиздат. 1981. 152 С.

## ИНЖЕКЦИОННЫЕ ТОКИ В АЛМАЗЕ

Мельников А.А., Филипп А.Р.

Белорусский государственный университет

Развитие электроники на алмазе сдерживается, кроме трудности получения этого материала электронного качества, двумя основными проблемами: отсутствием метода получения *n*-типа проводимости с приемлемыми параметрами и большой глубиной залегания уровня бора в *p*-типе (0.37 эВ), что приводит к малой концентрации ионизованных акцепторов при комнатной температуре (0.2 %) и значительному уменьшению подвижности при повышенных температурах вследствие рассеяния на ионизованных акцепторах. Эти проблемы преодолеваются в новом классе электронных приборов, использующих принцип переноса инжектированных носителей через диэлектрический алмаз. В таких приборах рабочей областью является непосредственно нелегированный алмаз.

В связи с этим становится актуальной задача создания контактов, инжектирующих электроны и дырки, и исследование инжекционных токов в алмазе.

На предварительно отполированных пластинах природного и синтетического алмаза методом ионной имплантации изготавливались *p-i-n* микроструктуры, представляющие собой две имплантированные области *p*- и *n*-типа, разделенные диэлектрическим промежутком. Ширина диэлектрического промежутка составляла 10 мкм. Контакты *p*-типа, инжектирующие дырки, были получены имплантацией ионов бора с распределенной энергией 25-150 кэВ и общей дозой  $2 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$  с последующим отжигом при температуре 1500° С для электрической активации атомов бора. Контакты *n*-типа, инжектирующие электроны, были получены имплантацией ионов лития с энергией 50 кэВ и дозой  $2 \times 10^{16} \text{ см}^{-2}$ . Слой *n*-типа обусловлен радиационными дефектами в слое ядерного торможения ионов и каналированными ионами Li, находящимися в междоузельном положении, в следующем за ним слое. Дозы имплантации в обоих случаях превышают критическую дозу аморфизации. При этом образующийся графитизировавшийся приповерхностный слой служит в качестве омического контакта к заглубленным слоям *p*- и *p*-типа проводимости.

Типичная вольтамперная характеристика (*VAX*) *p-i-n* структуры на алмазе представлена на Рис. 1. При превышении некоторой величины напряжения, зависящего от дефектно-примесной структуры алмаза, ток в прямом направлении через *p-i-n* структуру резко возрастает и выходит на кубическую зависимость тока от напряжения. Кубическая зависимость соответствует стандартной теории двойной инжекции в диэлектрике в режиме ограничения тока рекомбинацией [1]. В начальной области *VAX* рост тока обусловлен термоэлектронной эмиссией носителей заряда через барьер полупроводниковый алмаз - диэлектрический алмаз. Затем в большинстве кристаллов на *VAX* наблюдается область отрицательного дифференциального сопротивления, характерная для токов двойной инжекции в присутствии центров

захвата носителей заряда. Параметры области отрицательного сопротивления в значительной степени зависят от характера и концентрации ловушек, присутствующих в подложке.

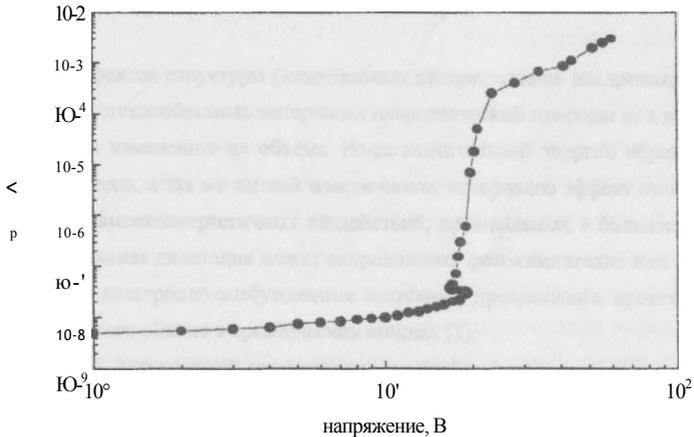


Рис. 1. Вольтамперная характеристика p-i-n структуры на основе природного алмаза.

Ток двойной инжекции пропорционален времени жизни неравновесных носителей. Увеличение концентрации центров рекомбинации приводит к уменьшению времени жизни носителей и соответствующему уменьшению тока. Исследования показали, что наиболее информативным методом контроля времени жизни носителей заряда в алмазе может выступать катодолюминесценция (КЛ). Характерной особенностью спектров КЛ кристаллов, в которых наблюдались токи двойной инжекции, является наличие полосы свободного экситона. Именно интенсивность свободного экситонного излучения, отражающая время жизни неравновесных носителей заряда, может выступать в качестве критерия оценки электрических параметров p-i-n структур.

Поскольку примесь азота является основной примесью в алмазе, были проведены исследования его влияния на токи двойной инжекции. Увеличение концентрации азота приводит к смещению ВАХ в область высоких напряжений. При концентрации азота в замещающем положении свыше  $10^{18}$  см $^{-3}$  ток через p-i-n структуры не наблюдается до напряжений **400 В**. Азот в А и В формах в меньшей степени влияет на токи двойной инжекции и соответствующая предельная концентрация составляет  $\sim 5 \times 10^{18}$  см $^{-3}$ .

Таким образом, показано, что определяющим фактором, влияющим на токи двойной инжекции в алмазе, является его дефектно-примесный состав. Эффект отрицательного сопротивления в p-i-n структурах на алмазе, имеющем ловушечные центры, может служить физической основой для создания переключающих элементов.

**Список литературы**

- [1]. ЛампертМ., Марк П. Инжекционные токи в твердых телах. Изд. «Мир», Москва. 1973. 416 С. ,

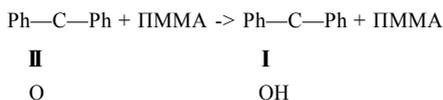
# МЕХАНИЧЕСКАЯ ДЕФОРМАЦИЯ СТЕКЛООБРАЗНЫХ ПОЛИМЕРОВ ПРИ РЕ- ЛАКСАЦИИ ИНДУЦИРОВАННЫХ ИЗЛУЧЕНИЕМ СТРУКТУРНЫХ ДЕФЕКТОВ

**Могильный В.В., Лазарева А.М.**

Белорусский государственный университет

Возникновение дефектов структуры (межузельных атомов, атомов внедрения, вакансий) в кристаллических и стеклообразных материалах неорганической природы под действием излучений приводит к изменению их объема. Из-за значительной энергии образования дефектов, их малых размеров, а так же низкой пластичности материалов эффект становится существенным лишь для высокоэнергетичных воздействий, применяемых в больших дозах [1]. Значительно более сильная дилатация может сопровождать фотохимические или другие, осуществляющиеся через электронно-возбужденные состояния, превращения, протекающие с увеличением молекулярного объема в органических стеклах [2].

Одной из подобных фотореакций, которую может также вызывать и образование триплетно-возбужденных состояний под действием жестких излучений, является фотовосстановление бензофенона (БФ), эффективно протекающее в стеклообразном полиметилметакрилате (ПММА) согласно следующей схеме:



Гибель образующейся радикальной пары происходит за время, сравнимое с временем жизни триплетного состояния, и определяется рекомбинацией метального радикала с радикалом матрицы, т. е. присоединением фотопродукта к полимеру. Такой характер процессов сохраняется в основном и в присутствии кислорода воздуха [3]. Раскрытие двойной карбонильной связи в соответствии с представлениями [2] может привести к увеличению молекулярного объема и дилатации материала.

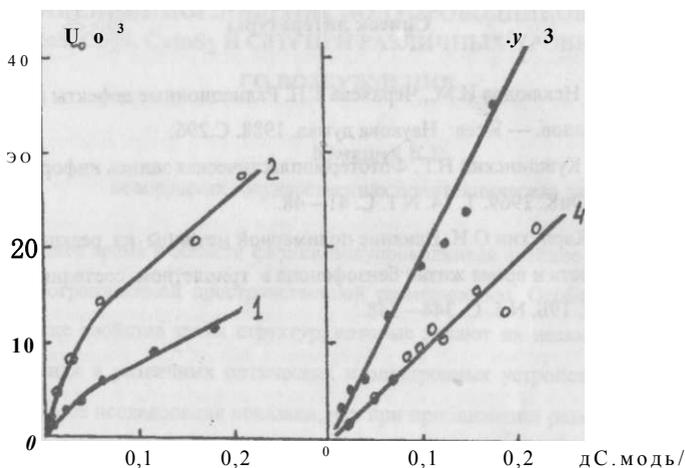
В наших исследованиях использовались твердые растворы БФ в стеклообразном ПММА и сополимеры, содержащие бензофеноновые остатки в боковой цепи макромолекул ПММА. Количество фотоактивных фрагментов составляло 3-5 мол.%. Прогрев однородно депонированных УФ излучением ( $\lambda >= 365$  нм) полимерных пластинок при температурах 323 К и выше приводил к относительному увеличению их объема в пределах 10%, сопровождавшемуся уменьшением показателя преломления и диэлектрической проницаемости в соответствии с формулой Клаузиуса-Моссотти. При ограничении поля экспонирования полимерных слоев, нанесенных на подложку, щелевой диафрагмой (ширина 1 мм) термический от-

жиг приводит к образованию положительного поверхностного рельефа (см. рисунок). Нарастание рельефа по мере накопления фотопродуктов нелинейно (кривые 1, 2), если БФ включен в боковую цепь полимера, тогда как добавление его к ПММА приводит к зависимостям, отличающимся хорошей линейностью (кривые 3, 4). Кажущаяся энергия активации процесса (200 - 250 кДж/моль вблизи 323 К) весьма велика и существенно не зависит от включения БФ групп в макромолекулы.

Как следует из рисунка (кривые 3, 4), амплитуда релаксационного рельефа композиций БФ-ПММА уменьшается с ростом массы линейных макромолекул полимерного компонента. Характер нелинейности кривых рельефообразования для сополимеров (кривые 1, 2) позволяет предположить, что увеличение молекулярной массы за счет образования разветвленных макромолекул при их сшивании приводит к аналогичному эффекту, так как уменьшение крутизны кривых происходит вблизи порога гелеобразования.

Измерения оптической толщины возникающего рельефа указывает на сохранение в этом процессе показателя преломления материала, возможно, вследствие сохранения его удельного объема. В таком случае коэффициент Пуассона, характеризующий процесс деформации при рельефообразовании, должен быть близок к 0,5, существенно отличаясь от обычного для ПММА значения  $\nu = 0,3$  и свидетельствуя о сильном поперечном по отношению к оси полоски сжатия материала. Последнее явление удалось экспериментально наблюдать на периодических рельефах (с периодами от 20 мкм до 100 мкм), полученных экспонированием через оптическую мишу. Поперечное сжатие материала приводило к легко регистрируемому на таком пространственном масштабе углублению впадин между экспонированными областями.

Ряд фактов указывает на важную роль сдвиговых деформаций в процессе формирования релаксационного рельефа. Прежде всего, это визуально наблюдаемое в изотермических условиях его зарождение в областях, прилегающих к границам экспонированной области, с дальнейшим распространением на всю экспонированную поверхность. Увеличение высоты рельефа при пространственно-периодическом распределении интенсивности активирующего излучения и сближении границ областей экспонирования также может быть отнесено к этому ряду. Сдвигом, очевидно, должно обеспечиваться и сохранение объема материала в процессе рельефообразования.



Даже сферически симметричный центр дилатации в среде, обладающей упругостью, создает локальное напряжение сдвигового характера и вполне естественно, что внешние деформации сдвига способствуют релаксации этих напряжений. По-видимому, еще более эффективным такое взаимодействие должно быть для анизотропных структур, образующихся при фотоприсоединении БФ. Направление макроскопического сдвига материала задается ориентацией границы экспонированного объема. В этом же направлении оказывается предпочтительной и деформация неравновесных микрообъемов, которая способствует релаксации тормозящих рельефообразование сдвиговых напряжений.

Возможность построения детального механизма релаксационного рельефообразования ограничивается приближенностью существующих представлений о микроскопической картине релаксации механических напряжений в полимерных стеклах. Ближайшим аналогом рассматриваемого явления может, по-видимому, служить вынужденная высокоэластичность и холодное течение стеклообразных полимеров. Эти явления описывают с помощью подхода, рассматривающего деформации как термофлуктуационный процесс перемещения сегментов полимерных цепей, энергия активации которого понижается в поле механических напряжений. Вынужденная высокоэластичность и холодное течение возникают при превышении внешними напряжениями предела, который понижается с ростом температуры. Подобная особенность характерна и для рассматриваемых деформаций, которые начинают развиваться при повышении температуры. Высокие энергии активации процесса указывают на значительные размеры кинетических единиц, участвующих в процессе релаксации, которые естественно отождествить с макромолекулярными сегментами.

#### Список литературы

- [1]. Зеленский В.Ф., Неклюдов И.М., Черняева Т.П. Радиационные дефекты и набухание металлов. — Киев: Наукова думка. 1988. С.296.
- [2]. Находкин Н.Г., Кувшинский Н.Г. Фототермопластическая запись информации//ЖНнПФиК. 1969. Т. 14. N 1.С. 41-48.
- [3]. Куценова А.В., Карпухин О.Н. Влияние полимерной матрицы на реакционную способность и время жизни бензофенона в триплетном состоянии // ВМС. 1977. Т. 19Б. N 5. С. 344—348.

## НЕЛИНЕЙНОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ МИКРОКРИСТАЛЛОВ CuS, Cu<sub>2</sub>S, CuInS<sub>2</sub> И CdTe ПРИ РАЗЛИЧНЫХ УРОВНЯХ ОПТИЧЕСКОГО ВОЗБУЖДЕНИЯ

**Юмашев К.В.**

Белорусская государственная политехническая академия

В последнее время в области физики полупроводников активно исследуются структуры с квантово-ограниченной пространственной размерностью. Особенно интересны нелинейно-оптические свойства таких структур, которые делают их весьма многообещающими для использования в различных оптических и электронных устройствах. Теоретические и экспериментальные исследования показали, что при приближении размера микрокристаллов (МК) к боровскому радиусу экситона их оптические свойства начинают существенно изменяться. Высокая нелинейная восприимчивость таких квантовоограниченных полупроводников по сравнению с объемными полупроводниками позволяет применять их, в частности, в качестве насыщающихся поглотителей для генерации ультракоротких лазерных импульсов.

В течение 1996 г. в лаборатории физики сверхбыстрых процессов МЛЦ БГПА были проведены работы по исследованию нелинейных оптических свойств полупроводниковых микрокристаллов CuS, Cu<sub>2</sub>S, CuInS<sub>2</sub> и CdTe.

Исследованные образцы представляли собой полупроводниковые микрокристаллы размером 3-5 нм в пленке поливинилового спирта (CuS, Cu<sub>2</sub>S, CuInS<sub>2</sub>) и стекле (CdTe). Химический состав образца и размер микрокристалла определялся и контролировался с помощью дифракции рентгеновских лучей и электронной микроскопии. Нелинейно-оптические свойства исследовались по дифференциальным спектрам поглощения (ДСП) в виде  $\Delta D(X) = I \cdot [T(I)/T_0(W)]$ , где  $T_0(I)$  и  $T(X)$  - пропускание образца соответственно без и в присутствии возбуждающего излучения. ДСП измерялись по методике "возбуждение-зондирование". Образец возбуждался импульсами второй (>, = 0.54 мкм) гармоники УА10з:ШЗ<sup>+</sup> лазера длительностью 15 пс, зондирование проводилось излучением пикосекундного континуума.

На Рис. 1 представлены ДСП образца CuS-МК при различных временах задержки  $t_d$  между возбуждающим и зондирующим импульсами. Возбуждение вызывает в образце CuS-МК наведенное поглощение во всем исследуемом спектральном диапазоне 480-920 нм. Спектральная форма наведенного поглощения зависит от  $t_d$ . При начальных значениях  $t_d < 30$  пс наведенное поглощение сосредоточено в основном в области длин волн 480-700 нм (Рис. 1,а), а при больших значениях  $t_d > 250$  пс оно перемещается в более длинноволновую

область 700-920 нм (Рис. 1 д). Изменение времени задержки от 30 пс до 250 пс сопровождается изменением спектральной формы ДСП, которая при дальнейшем увеличении  $t^{\wedge}$  от -250 пс до 500 пс (наибольшая доступная временная задержка на нашей установке) остается неизменной. Релаксация наведенного поглощения характеризуется двумя компонентами - быстрой, лежащей в области  $\sim 100$  пс, и медленной, имеющей характерное время, превышающее 500 пс. При этом амплитуда быстрой компоненты релаксации  $\Delta D$  уменьшается при увеличении длины волны зондирования  $\lambda_p$  (Рис. 1). В длинноволновой области ДСП, для  $\lambda_p \sim 900$  нанометров наблюдается только медленное разгорание наведенного поглощения, причем также с характерным временем  $\sim 100$  пс. Оба процесса вызваны поглощением носителей из разного типа ловушечных состояний, их интенсивность возрастает с увеличением интенсивности возбуждающего лазерного импульса, а характерное время определяется составом полупроводника и изменяется от 30 пс для Cu<sub>2</sub>S до 50 пс в CuInS<sub>2</sub> и 90 пс у CuS.

В ДСП CdTe наблюдается полосы просветления и наведенного поглощения. Максимум полосы просветления не смещается при изменении длины волны и интенсивности возбуждения (Рис. 2). Это говорит о низкой неоднородности уширения и показывает относительно узкое распределение микрокристаллов по размеру. Полоса просветления связана с насыщением энергетически наинизшего квантово-ограниченного перехода в результате заполнения состояний. Образование одной электронно-дырочной пары вызывает насыщение двух-частичных переходов (просветление пика линейного поглощения).

Наведенное поглощение связано с образованием четырех-частичных состояний в МК. Две электронно-дырочные пары создаются при поглощении одного фотона накачки и одного фотона зондирующего излучения. Поглощение зондирующего излучения без возбуждения эквивалентно генерации одной электронно-дырочной пары в невозбужденном МК. Но при предварительном возбуждении зондирующий пучок генерирует вторую электронно-дырочную пару в присутствии первой, которая образовалась в результате поглощения фотона возбуждающего излучения. Таким образом, нами наблюдалось образование четырех-частичных состояний в МК CdTe в стеклянной матрице.

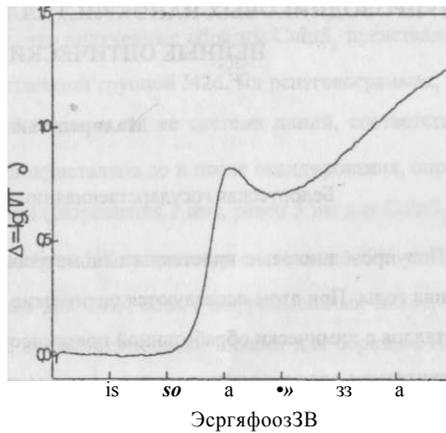
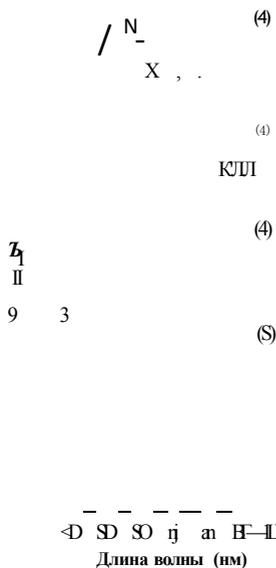


Рис. 1. Дифференциальные спектры поглощения ДЭ( $X_{Pr}$ ) образца CuS-НК в пленке ПВС, полученные при возбуждении лазерными импульсами длительностью 15 пс с длиной волны 540 нм. Время задержки между возбуждающим и зондирующим импульсами  $t_d = 26$  пс (а), 36 пс (б), 46 пс (в), 140 пс (г), 320 пс (д).

Рис. 2. Спектры линейного и дифференциального поглощения микрокристаллов CdTe в стеклянной матрице,

## ВЛИЯНИЕ ХАРАКТЕРА ХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ CuS, Cu<sub>2</sub>S И CuInS<sub>2</sub> НА ИХ ЛИ- НЕЙНЫЕ ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

«                      Маляревич А.М.

Белорусская государственная политехническая академия

Полупроводниковые кристаллы нанометровых размеров (НК) активно изучаются в последние годы. При этом исследуются оптические характеристики полупроводниковых нанокристаллов с химически обработанной поверхностью. Поскольку отношение числа атомов в поверхностном слое к полному их числу в нанокристалле составляет  $\sim 1/3$ , то поверхностные состояния вносят существенный вклад в оптические свойства нанобъекта и, естественно, будут чувствительны к химическому воздействию на поверхность. Исследования, направленные на изучение воздействия химического модифицирования поверхности НК на их оптические свойства представляют несомненный интерес, как с точки зрения фундаментальной физики, так и в прикладном аспекте (например, для применения в нелинейно-оптических устройствах).

В течение 1996 года в Международном лазерном центре при БГА были синтезированы и исследованы линейные оптические свойства нанокристаллов CuS, Cu<sub>2</sub>S и CuInS<sub>2</sub> в полимерной пленке, которые в процессе приготовления подвергались частичному химическому модифицированию (окислению) их поверхности.

CuS и Cu<sub>2</sub>S-НК химически синтезировались в виде коллоидного раствора в результате реакции между CuCl<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>S (состав образца определялся процентным соотношением реагентов). Коллоидный раствор CuInS<sub>2</sub> приготавливался путем реакции между раствором, содержащим Cu и In, и сероводородом H<sub>2</sub>S. CuCl<sub>2</sub> и H<sub>2</sub>S растворялись в 5% водном растворе поливинилового спирта (ПВС). Концентрация CuS, Cu<sub>2</sub>S и CuInS<sub>2</sub> составляла  $5 \cdot 10^{-3}$  М. Часть этого раствора (1 мл) выливалась на кварцевую пластинку и высушивалась до образования прозрачной пленки ПВС. Оставшийся коллоидный раствор медленно нагревался до 70° С. При нагревании CuS, Cu<sub>2</sub>S и CuInS<sub>2</sub>-НК подвергались термическому окислению растворенным кислородом, и цвет раствора изменялся от темнокоричневого до темнозеленого. Темнозеленый раствор (1 мл) после охлаждения до комнатной температуры использовался для приготовления окисленных образцов CuS, Cu<sub>2</sub>S и CuInS<sub>2</sub> в ПВС. Толщина пленок ПВС, содержащих изучаемые ОНК, составляла  $\sim 80$  нм.

Исследование состава полученных соединений проводилось с помощью рентгеновского анализа на диффрактометре HZG 4A в  $\text{SiK}_\alpha$  излучении с никелевым фильтром ( $\lambda = 0.154$  нм). Диффрактограмма указывает, что полученные образцы  $\text{CuInS}_2$  представляют собой структуру халькопирита с пространственной группой I42d. На рентгенограммах, снятых для образцов  $\text{CuS}$  и  $\text{Cu}_2\text{S}$ , присутствовала одна и та же система линий, соответствующая структуре ковеллита. Средний радиус нанокристаллов до и после оксидирования, определенный с помощью электронной микроскопии (разрешение 1 нм), равен 3 нм для  $\text{CuInS}_2$  и 5 нм для  $\text{CuS}$  и  $\text{Cu}_2\text{S}$ . Среднеквадратичный разброс НК по размеру составлял ~20% от среднего значения. Отсутствие на рентгенограммах для ОНК новых дифракционных пиков, а также заметного их уширения по сравнению с соответствующими пиками для образцов НК показывает, что оксидированию подвергался лишь тонкий поверхностный слой НК, в то время как больший внутренний объем НК воздействию не подвергался.

Спектр поглощения  $\text{CuInS}_2$ -НК приведен на Рис. 1 (кривая 1). Кривая 3 на Рис. 1 представляет собой спектр поглощения образца  $\text{CuInS}_2$ -ОНК и содержит дополнительную широкую полосу в области 0.65-1.9 эВ. В области 2.3-3.6 эВ спектры поглощения оксидированного и неоксидированного образцов практически совпадают, поэтому можно говорить, что оксидированию подвергается тонкий поверхностный слой нанокристалла. Дополнительная полоса поглощения (4), полученная путем вычитания кривой (1) из кривой (3), может быть вызвана переходами с переносом заряда между  $\text{Cu}$  и  $\text{Cu}^{2+}$ . Двухвалентная медь  $\text{Cu}^{2+}$  появляется в  $\text{CuInS}_2$ -ОНК после оксидирования. Аналогичный эффект наблюдался для оксидированных нанокристаллов  $\text{CuS}$ . Спектр люминесценции образца  $\text{CuInS}_2$ -НК представляет собой широкую полосу с максимумом при 1.32 эВ (Рис. 1, кривая 2). Максимум люминесценции сдвинут относительно экситонного пика на 0.46 эВ. Люминесценция с таким большим стоксовским сдвигом не может быть связана с прямой электронно-дырочной рекомбинацией, а вызвана, очевидно, излучательной рекомбинацией с поверхностных состояний, которым отвечают энергетические уровни, расположенные внутри запрещенной зоны.

Объемный  $\text{CuS}$  имеет ширину запрещенной зоны, обусловленную непрямыми переходами, 2.1 эВ. Образец  $\text{CuS}$ -ОНК имеет дополнительно полосу поглощения с максимумом при 1.09 мкм.

Наблюдаемые явления позволили нам предложить схему энергетических уровней для исследованных оксидированных образцов (Рис. 2) с присутствием внутри запрещенной зоны ловушечных состояний и энергетических состояний, имеющих характер донора электронов (т.е. эффективная "валентная зона") и формирующихся в процессе термического оксидиро-

вания. Переходы между этими состояниями и валентной зоной обуславливают дополнительную полосу поглощения в видимой-ближней ИК области.

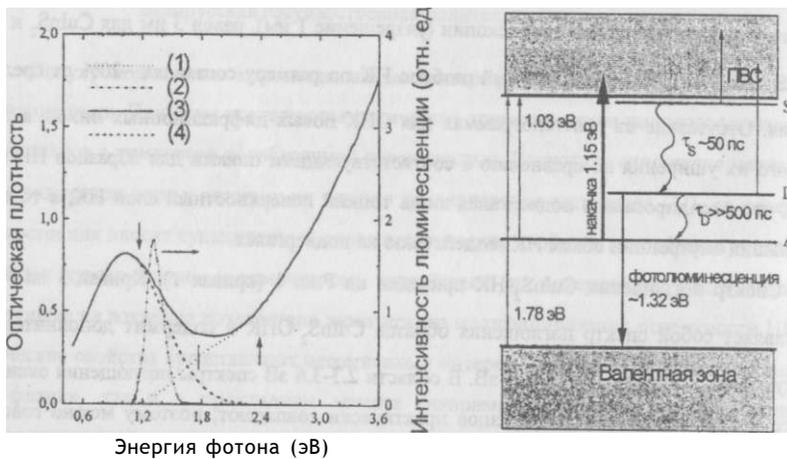


Рис. 1. Спектры поглощения  $\text{CuInS}_2\text{-НК}$  (1) и  $\text{CuInS}_2\text{-ОНК}$  (3) в пленке ПВХ. (4) - разность между спектрами (3) и (1). (2) - спектр фотолюминесценции  $\text{CuInS}_2\text{-НК}$  при температуре 10 К.

Рис. 2. Диаграмма энергетических уровней  $\text{CuInS}_2\text{-ОНК}$  в пленке ПВХ.

## СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТИ СЕРЕБРЯНОГО ЭЛЕКТРОДА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЙ ЯЧЕЙКИ И СПЕКТРЫ ГИГАНТСКОГО КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ АДСОРБИРОВАННЫХ МОЛЕКУЛ

Маскевич С.А., Стрекаль Н.Д., Свекло И.Ф.

Гродненский государственный университет

Для исследований механизма усиления сигнала комбинационного рассеяния (КР) органических молекул, адсорбированных на металлической поверхности необходимы сведения о возможной структуре адсорбата. Сканирующий туннельный микроскоп (СТМ) является мощным инструментом для исследований структуры поверхности металлов и адсорбированных на них слоев. Целью данной работы является разработка конструкции СТМ для работы в электрохимической ячейке, способного контролировать структуру рабочего электрода и осаждаемых на его поверхности адсорбатов во время циклов окисления/восстановления.

### Конструкция электрохимической ячейки для исследований при помощи сканирующего туннельного микроскопа

Разработана следующая конструкция электрохимической ячейки (Рис.1). Стеклопластиковая пластина 9 одновременно используется в качестве несущей поверхности для узла сканирования 1 и исследуемого образца (рабочий электрод) 6, другой конец которого выведен через отверстие на другую сторону пластины. Стеклопластиковое кольцо 5, прижимается через 0-образную витонитовую прокладку к пластине 9 с помощью металлического фланца 4 и винтов 3. Таким образом, получается герметичная емкость с диаметром 11 мм и высотой 5 мм для заполнения рабочим электролитом. Верхняя часть этой области открыта, и держатель иглы 2 может свободно подводиться/отводиться к/от поверхности. Стеклопластиковые прокладки 8 служат для грубой настройки начального расстояния игла - исследуемая поверхность в зависимости от толщины электрода 6. При подводе/отводе игла движется в направлении Z; область исследования можно грубо выбирать передвигая узел сканирования 1 в направлениях X,Y. Разъем 10, установленный на верхней части узла сканирования служит для подключения электрических цепей, обеспечивающих подачу требуемых напряжений на электроды узла сканирования. Более подробно конструкция узла сканирования показана на Рис. 2 (вид сверху).

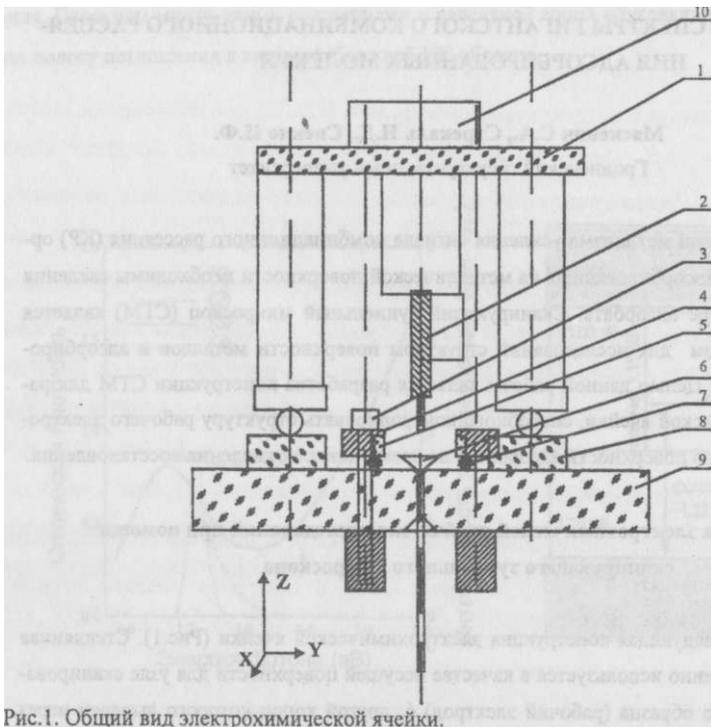


Рис.1. Общий вид электрохимической ячейки.

- 1 - узел сканирования, 2 - держатель иглы, 3 - винт, 4 - металлический фланец, 5 - стеклянное кольцо, 6 - рабочий электрод, 7- уплотнительное кольцо, 8 - стеклянная прокладка, 9 - несущая пластина, 10 - контактный разъем.

К кварцевой пластине прикреплены три периферийных пьезокерамических **цилиндра** (A, B, C) и один центральный (D). Периферийные цилиндры используются в качестве **опор** на несущую пластину 9 (Рис. 1). Внутреннее и внешнее проводящее покрытие **цилиндров** разделено на 8 сегментов-электродов, из которых по две пары используются для создания перемещения/смещения в направлениях X,Y, а оставшиеся пары ~ для совместного **перемещения** во время сканирования узла сканирования и держателя иглы в Z направлении. Для подвода/отвода иглы к/от поверхности образца используется инерционный двигатель, **собранный** на пьезокерамическом цилиндре D. Пьезокерамический цилиндр D имеет **направляющую** 12 с двумя парами опорных шариков 11, на которые опирается держатель **иглы** 2 (см. также Рис. 1). При подаче пилообразного напряжения на внутренний/внешний **электрод** держатель иглы начинает проскальзывать относительно опорных шариков и тем самым **передвигаться** в Z направлении.

Рис.2. Узел сканирования (вид сверху).

А, В, С, D - пьезокерамические цилиндры, 2 - держатель иглы,  
11 - опорные шарики, 12 - направляющая.

Для управления движением туннельной иглы, сбора и обработки данных используется ранее разработанный нами электронный блок системы управления для сканирующего атомно-силового микроскопа и программа для IBM совместимого компьютера.

### **Приготовление иглы туннельного микроскопа**

Для приготовления иглолок туннельного микроскопа использовалась вольфрамовая проволока диаметром 100 мкм. При механическом срезании такой проволоки получается неоднородный срез с микроскопическими выступами; во время сканирования между наиболее высоким выступом и исследуемой поверхностью протекает туннельный ток. Таким образом приготовленные иглы могут быть использованы для СТМ исследований на воздухе.

Для исследований в среде проводящего электролита поверхность иглы должна быть покрыта слоем электрохимически нейтрального вещества так, чтобы только самый кончик иглы оставался проводящим. Иглы туннельного микроскопа, приготовленные механическим срезанием могут иметь множественные выступы, несущественные во время работы на воздухе, но приводящие к существенному увеличению тока утечки при работе в среде электролита. Поэтому мы покрывали слоем парафина электрохимически заточенные иглы по методике, аналогичной [1].

При электрохимическом травлении вольфрамовой проволоки в 10% растворе КОН можно подобрать такой режим, что у кончика проволоки, опущенной в электролит, образуется шейка. По мере травления в определе....." момент происходит отрыв нижней части проволоки. В этот момент на нижней части проволоки образуется очень острый выступ, который можно использовать в качестве острия, и электронная схема отключает подачу напряжения на проволоку. Следует отметить, что режим травления, при котором происходит подтравливание кончика проволоки и последовательный отрыв зависит от многих параметров, таких

как концентрация электролита, диаметр проволоки и глубина ее погружения в электролит, напряжение травления и каждый раз определяется экспериментально.

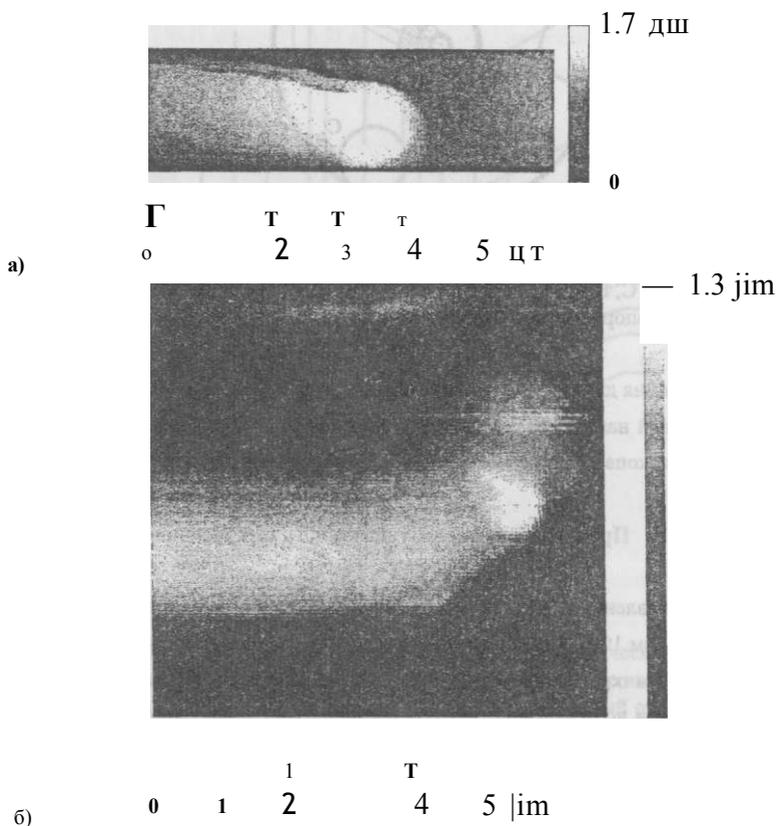


Рис. 3. АСМ-изображения кончиков типичных острий.  
 (Острие б слегка искривлено, что связано, по видимости, с отрывом слишком большого кусочка проволоки)

Для получения изображений поверхности полученных острий мы использовали АСМ. На Рис. 3 показаны АСМ-фотографии типичных острий. Учитывая, что при получении АСМ-изображения происходит сканирование поверхности острия при помощи другого острия, полученного таким же способом, можно оценить радиус кривизны острия  $\sim 250$  нм, что находится в соответствии с геометрическими параметрами острий, полученных аналогичным образом [1-4].

Однако, острия с данными геометрическими параметрами не могут обеспечить атомное разрешение на графите. Для контроля качества изготовленного микроскопа было получено атомное разрешение на свежем сколе пиролитического графита (Рис. 4). При этом

использовалось острое, полученное механическим срезом. Попытки спользования электрохимически заточенного острия положительных результатов не дали. Поэтому следует рассмотреть возможность дополнительной обработки полученных острий либо электрохимическим способом, либо ионной обработкой в вакууме.

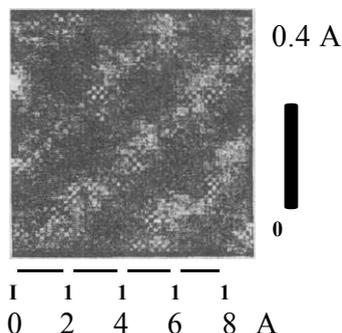


Рис.4. СТМ-изображение поверхности пиролитического графита.

#### Список литературы

- [1]. Nagahara L.A., Thudant T., Lindsay S.M. Preparation and characterizations of STM tips for electrochemical studies // *Rev. Sci. Instrum.* 1989. 60.N 10. P. 3128-3130.
- [2]. Zhang P. and Ivey D.G. Preparation of sharp polycrystalline tungsten tips for scanning tunneling microscopy imaging// *J. Vac. Sci. Technol.* 1996. B 14(1). Jan/Feb.
- [3]. Wandlowski Th., Lampner D., Lindsay S.M. Structure and stability of cytosine adlayers on Au(111): an in-situ STM study // *J. of Electroanalytical Chemistry* 1996. 404. P. 215-226.
- [4]. Noli J.D., Van Patten P.G., Nicholson M.A., Booksh K., and Myrick Flow M.L. Injection system for scanning tunneling microscope // *Rev. Sci. Instrum.* 1995.66(8), August.

## ЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ ПОРИСТОГО КРЕМНИЯ, ЛЕГИРОВАННОГО РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫМ ЭЛЕМЕНТОМ (ЭРБИЕМ)

**Бондаренко В.П., Ворозов Н.Н., Долгий Л.Н.,  
Дорофеев А.М., Казючиц Н.М.\*, Троянова Г.Н.**

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

\* Белорусский государственный университет

Легирование кремния редкоземельными элементами, в частности, эрбием - перспективное направление оптоэлектроники, поскольку структуры Si:Er излучают свет с длиной волны 1.54 мкм, соответствующей минимуму потерь и дисперсии кварцевой волоконной оптики [1]. Формирование поверхностного слоя низкоразмерного пористого кремния (ПК) позволяет существенно упростить процесс легирования кремния эрбием.

Экспериментальные структуры на основе низкоразмерного ПК изготавливали на кремнии p- и n- типов проводимости с различной кристаллографической ориентацией и удельным сопротивлением: КДБ-12(100); КДБ-Ю(Ш); КДБ-0,3(111); КЭС-0,01(111). Слои низкоразмерного ПК толщиной 1-20 мкм формировали на указанных подложках при плотностях анодного тока 1-1000 мА/см<sup>2</sup> в электролитах с концентрацией HF от 12% до 48%. Затем проводили катодное осаждение эрбия из спиртового раствора Er(NQ))<sub>5</sub>H<sub>2</sub>P при катодной густоности тока 0,125 мА/см<sup>2</sup>.

Для легирования низкоразмерного пористого кремния редкоземельным элементом (эрбием) и его оптической активации проводили термообработку экспериментальных структур методами изотермического отжига в диффузионной печи при температуре 1200 °С на воздухе и секундного отжига некогерентным светом при температуре 800-1150 °С в течение 30 секунд. Для возбуждения люминесценции использовали аргоновый лазер ( $\lambda_{ис} = 488$  нм). Снятие спектров фотолюминесценции низкоразмерного пористого кремния, легированного эрбием, проводили при 77К и 300К с использованием решеточного монохроматора МДР-23 с Ge:Cu фотоприемником, охлаждаемым жидким азотом.

Установлено, что после высокотемпературного (800-1200 °С) отжига на всех образцах ПК, легированных эрбием, был зарегистрирован узкий пик люминесценции с характерной для эрбия длиной волны 1.54 мкм. В контрольных образцах без ПК с электрохимически осажденным Er такая люминесценция отсутствовала. Интенсивность 1.54 мкм люминесценции слоев пористого кремния на p'-кремнии была существенно ниже по сравнению с ПК на n-кремнии. Такое различие может быть связано как с различной структурой пористых материалов p- и p<sup>+</sup>-типов [3].

Интенсивность излучения, связанного с оптически активным Eг, зависела от температуры термообработки. Для ПК р-типа увеличение температуры отжига до 1000 °С сопровождалось ростом интенсивности 1.54 цт пика. По-видимому, это связано с увеличением степени окисления поверхности пор и, соответственно, с повышением степени оптической активации ионов эрбия, необходимым условием которой является образование комплексов иона  $Eг^{+3}$  с 6 атомами кислорода [4]. Дальнейший рост температуры приводил к уменьшению интенсивности люминесценции эрбия, что может быть связано с диссоциацией примесных комплексов "эрбий-кислород" или образованием в кремниевом остове пористого слоя дефектов, увеличивающих вероятность безызлучательной рекомбинации [1]. Для более плотного пористого материала п<sup>+</sup>-типа требовалась более высокая, до 1200 °С, температура и длительность отжига 5-20 минут для появления люминесценции на длине волны 1.54 цт.

Увеличение толщины слоя ПК при неизменных условиях осаждения эрбия сопровождалось ростом интенсивности 1.54 цт люминесценции. При постоянных длительности осаждения и плотности катодного тока, количество введенного эрбия должно быть одинаковым. Рост интенсивности 1.54  $\mu m$  излучения, таким образом, свидетельствует об увеличении доли оптически активного Eг с увеличением толщины ПК. Это косвенным образом подтверждает, что осаждение металла происходит преимущественно на стенки пор, а не на поверхность образца.

Следует особо отметить тот факт, что интенсивность Eг пика практически не изменялась при увеличении температуры измерения с 77 К до комнатной, в отличие от легированного эрбием монокристаллического кремния, для которого характерно резкое, на несколько порядков, падение интенсивности 1.54 цт люминесценции [1]. Сопоставительный анализ [2] различных полупроводников, легированных эрбием, показал, что с ростом ширины запрещенной зоны полупроводника от 0.807 eV (для GaInAsP) до 2.42 eV (для CdS) наблюдается ослабление температурного гашения Eг излучения. Наблюдаемая экспериментально слабая температурная зависимость интенсивности 1.54 цт излучения может свидетельствовать о том, что ион  $Eг^{+3}$  находится в материале с увеличенной, по сравнению с исходным кремниевым монокристаллом, шириной запрещенной зоны. Этим материалом могут быть как кремниевые нанокристаллиты с модифицированной вследствие квантово-размерного эффекта зонной структурой, так и аморфный слой на их поверхности, а также слой окисла на поверхности пор. В пользу последнего предположения свидетельствует исчезновение Eг люминесценции при травлении материала в плавиковой кислоте, Удаляющей окисел.

Таким образом, полученные экспериментальные результаты показывают, что для формирования светоизлучающих структур можно использовать пористые материалы как

кремнии  $p^+$ -типа. Последний широко используется для геттерирования дефектов и формирования изолирующих областей и структур "Кремний-На-Изоляторе", а также в качестве буферного слоя в гомо- и гетероэпитаксиальных структурах. Легирование такого материала эрбием позволяет расширить диапазон изготавливаемых на кремнии приборных структур. В частности, введение эрбия в интегральные оптические волноводы на основе пористого кремния может быть использовано для устройств фильтрации, усиления и генерации оптических сигналов.

#### Список литературы

- [1]. Соболев Н.А. // ФТП. 1995. Т.29. Вып. 7. С. 1153-1177.
- [2]. Namavar F., Lu F., Perry C.H. et al. // MRS Symp. Proc. 1995. V.358. P.375-380.
- [3]. Smith R.L. and Collins S.D. // J. Appl. Phys. 1992. V.71. P. R1-R22.
- [4]. Adler D.L., Jacobson D.C., Eaglesham D.J. et al. // Appl. Phys. Lett. 1992. V.61. P.2181-2183.

## РАЗРАБОТКА ФИЗИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В ДВУМЕРНЫХ И КВАЗИДВУМЕРНЫХ КРЕМНИЕВЫХ И АРСЕНИД-ГАЛЛИЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ

**Борздов В.М., Комаров Ф.Ф., Галенчик В.О., Хомич А.В.**

Белорусский государственный университет

!

В связи с широким использованием в настоящее время в твердотельной и микроэлектронике кремниевых МОП-полевых транзисторов, а также гетероструктур на основе арсенида галлия, важное научное и практическое значение приобретает исследование процессов переноса электронов в проводящих слоях этих структур. Хорошо известно (см., например обзор [1]), что толщина таких слоев сравнима с длиной волны де-Бройля электрона, поэтому его энергия квантуется в направлении, перпендикулярном границе раздела окисел-полупроводник. Это обстоятельство может оказывать существенное влияние на перенос носителей заряда в таких структурах, являющихся, по своей сути, квазидвумерными электронными системами.

Целью данной работы являлась разработка физической модели переноса электронов в двумерных и квазидвумерных кремниевых и арсенид-галлиевых полупроводниковых структурах, а также расчет в них дрейфовой скорости и подвижности носителей заряда.

Прежде всего в настоящей работе была решена задача самосогласованного расчета волновых функций и электронных состояний в инверсионном слое кремния при различных значениях температуры и поверхностной концентрации электронов. Уравнения Шредингера, Пуассона и соответствующие граничные условия имели следующий вид [2]

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(z)}{dz^2} + e \Phi(z) \psi(z) = E \psi(z), \quad (1)$$

$$\frac{d \Phi(z)}{dz} = e N_s - e n(z) + e p(z), \quad (2)$$

$$\Phi(0) = \psi'(0) = 0, \quad (3)$$

$$\Phi(L) = \psi'(L) = 0, \quad (4)$$

где  $\psi(z)$  ( $\psi_i$ ) - волновая функция электрона в  $i$ -той подзоне;  $E_i$  - величина энергии дна подзоны;  $N_s$  - относительное заполнение этой подзоны;  $N_s$  - поверхностная концентрация инверсных электронов;  $\rho_{dep}$  - плотность заряда обедненной области;  $e$  - заряд электрона;  $m_0$  - его

фактивная масса в направлении квантования, перпендикулярной границе раздела окисел-полупроводник;  $\epsilon_0$  - диэлектрическая постоянная;  $\epsilon_s$  - диэлектрическая проницаемость

кремния;  $I$  - редуцированная постоянная Планка. Уравнение Шредингера (1) решалось методом Нумерова [3], а уравнение Пуассона (2) - методом обратной прогонки [4].

Полученное первоначально самосогласованное решение включалось затем в самосогласованную процедуру кинетического моделирования переноса электронов методом Монте-Карло. При этом учитывались следующие механизмы рассеяния: межподзонное и внутривидовое на фононах, на зарядах окисла, а также на шероховатостях поверхности .

Самосогласованная процедура Монте-Карло состояла в следующем. Предварительно рассчитывалась относительная заселенность электронов по подзонам по формуле [2]

$$N_i = \frac{V_i m_{di} k_B T}{\pi \hbar^2 N_s} \cdot \ln \left\{ 1 + \exp \left[ \frac{E_f - E_i}{k_B T} \right] \right\}, \quad (5)$$

где  $V_i$  - кратность вырождения  $i$ -той подзоны;  $m_{di}$  - масса плотности состояний в этой подзоне;  $E_f$  - энергия Ферми. В соответствии с этим, на первом шаге, полагая, что значения  $N_i$  для каждой подзоны известны и подставляя их в уравнение (2), решалась систем уравнений (1)-(4) и определялись соответствующие данным  $N_i$  значения  $E_i$  и  $A_i(z)$ . В дальнейшем эти значения использовались для расчета интенсивностей рассеяния в процессе моделирования переноса электронов методом Монте-Карло, и по результатам моделирования уточнялись значения заселенностей подзон согласно формуле

$$(6)$$

где  $T_i$  - полное время нахождения электрона в  $i$ -той подзоне. Эти уточненные значения  $N_i$  вновь подставлялись в систему уравнений (1)-(4), которая затем снова решалась уже с новыми значениями  $A_i$  и т.д. Описанная последовательность действий повторялась до полной сходимости результатов. Данная процедура позволила учесть влияние переноса электронов в поле на заселенность и структуру подзон и тем самым повысить точность моделирования.

Особый интерес не только для теории но, и для практических приложений представляет случай так называемого электрического квантового предела, когда заселенной оказывается только одна нижайшая подзона, и электронный газ является строго двумерным. В настоящей работе были рассмотрены задачи построения модели переноса электронов и расчета их подвижности в таком двумерном электронном газе при низких температурах и слабых электрических полях. Алгоритм моделирования включал в себя все основные этапы, характерные для одночастичного метода Монте-Карло, но при этом были учтены следующие особенности. Во-первых, так как точность метода падает в слабых полях, объем моделируемой выборки должен быть достаточно большим. Во-вторых, поскольку электронный газ в исследуемых условиях является вырожденным, процедура Монте-Карло должна включать принцип Паули. Учитывалось рассеяние на удаленной и фоновой примеси,

на шероховатостях поверхности, а также зависимости соответствующих интенсивностей рассеяния от поляризуемости двумерного электронного газа.

Результаты расчета дрейфовой скорости и подвижности электронов в инверсионном слое кремния и в гетероструктурах с селективным легированием на основе GaAs при температурах  $T=4.2$ ,  $77$  и  $300$  К с последующим сравнением этих результатов с известными теоретическими и экспериментальными данными подтвердили адекватность построенной модели переноса.

Таким образом, представленные в докладе результаты свидетельствуют о реальной возможности использования метода Монте-Карло для моделирования переноса электронов в полупроводниковых слоях, содержащих квазидвумерный и двумерный электронный газ.

### Список литературы

- [1]. Андо Т., Фаулер Ф., Стерн Ф. Электронные свойства двумерных систем. М. Мир. 1985. 416 С.
- [2]. Shirahata M., Taniguchi K., Hamaguchi C. // Jap. J. Appl. Phys. 1987. V. 26. P. 1447-1452.
- [3]. Chow P.C.//APJ. 1978. V. 40. P. 730-734.
- [4]. Самарский А.А., Гулин Ф.В. Численные методы. М. Наука . 1989. 432 С.

# КУЛОНОВСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ДЕЛОКАЛИЗОВАННЫХ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В 5-СЛОЕ ПОЛУПРОВОДНИКА

Ц(Аслонский Н.А., Сягло А.И.

Белорусский государственный университет

Кулоновское корреляционное и обменное взаимодействия между электронами (л) или/и дырками (р) в квантово-размерном слое полупроводника (5-слое) учитываются при исследовании процессов переноса заряда [1] и люминесценции [2]. Считается, что эти взаимодействия обуславливают сужение запрещённой энергетической зоны 6-слоя GaAs, расположенного в матрице  $Al_xGa_{1-x}As$ , при сильном фотовозбуждении [3]. В известных моделях [4,5] при описании корреляционного взаимодействия электроны (дырки) считались точечными зарядами.

Цель работы - учёт "поперечной" неточности делокализованных носителей заряда в 6-слое полупроводника при расчёте их корреляционного и обменного взаимодействий.

Волновая функция электрона для  $I$ -го квантового уровня в кристаллическом 5-слое толщиной  $L$  и площадью поверхности  $S$  имеет вид [2]:

$$\psi(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \sin(yz) \exp(-\alpha r), \quad (1)$$

где  $I = 1, 2, 3, \dots$ ,  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{r}$  - двумерные квазиволновой вектор и радиус-вектор; ось  $z$  направлена перпендикулярно плоскости слоя.

Рассмотрим корреляционное взаимодействие между частицами, находящимися только на нижнем уровне энергии ( $I = 1$ ). Распределение плотности заряда электрона (дырки) по толщине 5-слоя  $\rho(z, r) = + (2e/Z) \sin^2(nz/L) S(r)$ , где  $-e < 0$  - заряд электрона,  $S(r)$  - двумерная функция Дирака, аппроксимируем выражением:

$$\rho(\cdot, r) = \begin{cases} \frac{2e}{L} \sin^2(nz/L) S(r) & \text{при } L/4 < z < 3L/4, \\ 0 & \text{при } z < L/4, z > 3L/4. \end{cases} \quad (2)$$

С учётом (2) энергия чисто кулоновского (неэкранированного) взаимодействия двух одноименно заряженных частиц в 8-слое есть:

$$U(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^L \frac{dz'}{4r^2 + (Z - Z')^2}$$

где

$$\text{arsh: } \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{z^2}{L^2}}} + 1 - 1 \quad (3)$$

Здесь  $\epsilon = \epsilon_0 \epsilon$ ,  $\epsilon_0$  - статическая диэлектрическая проницаемость кристаллической решетки 6-слоя,  $\epsilon_0$  - электрическая постоянная;  $\epsilon(z)$  - 1 при  $L \rightarrow 0$ .

Энергия корреляционного взаимодействия дырки и экранирующих её электронов  $E = E_p + E_{\text{им}}$ , равна, следуя схеме расчета [6], сумме энергии взаимодействия дырки с экранирующим её облаком электронов  $E_{pn}$  и энергии взаимодействия электронов облака (с суммарным зарядом  $-e$ ) между собой  $E_{\text{им}}$ , так что

$$E_{pn} = \int_0^L \rho(r) \frac{e^2}{4\pi r^2} dr \quad (4)$$

где  $\rho(r)$  - плотность экранирующего электрон (дырку) заряда; интегрирование в (4) проводится по всей площади 6-слоя.

Плотность экранирующего электрон (дырку) заряда  $\rho_s(r)$  находим из линеаризованного уравнения Пуассона

$$\Delta \phi = 0 \quad \text{при } z < \frac{L}{4}; z > \frac{3L}{4}$$

где  $X = (2z/e^2)(dn/dF_{\text{н}} + dp/dF_p)J'$

- длина экранирования электростатического поля;  $F_{\text{н}}$  и  $F_p$ ,

- квазиуровни Ферми для электронов и дырок

Модуль потенциала взаимодействия между зарядами в 6-слое ищем в виде [4]:

$$\phi(r) = \int_0^\infty J_0(kr) \Phi(k, L, X) dk \quad (5)$$

где  $J_0(kr)$  - функция Бесселя нулевого порядка,  $\Phi(k, L, X)$  - Фурье-образ функции экранирования  $\chi(v > 0) = v = r/X$ ,  $\chi =$

Полагая, что как экранируемый заряд, так и экранирующие его заряды, распределены по толщине слоя согласно аппроксимации (2), получаем:

$$\Phi(\nu) = F \int_0^{\nu} \frac{1 - \kappa \operatorname{sh}(kL/4)}{\kappa \operatorname{ch}^2(Z/4) + \kappa \operatorname{sh}^2(Z/4)} dZ \quad (6)$$

где  $F = i^2 + 4/U$ .

Функция экранирования  $\chi(\nu, Q)$  изображена на Рис. 1. Для больших расстояний между зарядами ( $r \gg L$  или  $\nu \gg Q$ ) функция экранирования принимает известный [4,5] вид с фурье-образом  $\Phi(\text{АДД}) \rightarrow 1/(a + \Gamma')$

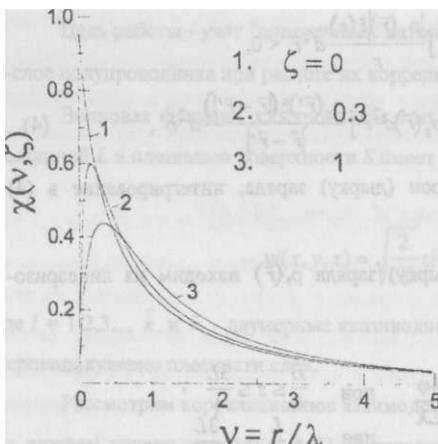


Рис. 1. Зависимость функции экранирования от расстояния до экранируемого заряда в плоскости б-слоя при разных отношениях  $C_s = L/\lambda$  толщины слоя и длины экранирования

Среднюю по волновому вектору энергию обменного взаимодействия между электронами (или дырками) при  $F \ll kT$  ( $kT$  - тепловая энергия) можно, следуя [7], при использовании точной формулы (1) привести к виду (ср. [8]):

$$\Gamma^{(MC)}(\mathbf{p}) \approx \frac{e^2}{4(2\pi)^3} \int_{\mathbf{k} < k_F} \frac{d^2 k'}{k' - k'} \quad (7)$$

где  $\mathbf{k}'$  - квазиволновой вектор Ферми для электрона (дырки) с эффективной массой  $m^*$ .

Полученные формулы (3) - (7) для расчёта обменной и корреляционной энергий применимы, когда средняя кинетическая энергия электронов (дырок) меньше разницы между энергиями второго ( $l = 2$ ) и первого ( $l = 1$ ) уровней размерного квантования  $E_2 - E_1 = \hbar E$ , т.е., когда  $p$  или/и  $p < 3\lambda/2L^2$ .

### Литература

1. Шик А.Я. ФТП. 1992, 26, №7, 1161-1181.
2. Yoffe A. D. Adv. Phys. 1993, 42, №2, 173-262.
3. Варданян Б.Р., Юнович А.Э. ФТП. 1995, 29, №11, 1976-1986.
4. Рытова. Н. С. Вестн. МГУ. Физ., астрон. 1967, №3, 30-37.
5. Шик А.Я. ФТП. 1995, 29, №8, 1345-1381.
6. Поклонский Н. А., Сягло А. И., Боровик Ф. Н. ФТП. 1996, 30, № 10, 1767-1773.
7. Ашкрофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела (М., 1979), т.1. 334.
8. Чаплик А. В. ЖЭТФ. 1971, 60, №5, 1845-1852.

## ЭФФЕКТЫ ЛОКАЛИЗАЦИИ В КВАЗИ-ОДНОМЕРНЫХ СИСТЕМАХ ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ.

«

**Крылов Г.Г.**

Белорусский государственный университет

Эффект локализации электронных состояний идеальной одномерной цепи при наличие сколь угодно малого беспорядка в системе, обусловленного примесными атомами рассматривался с начала 50-х годов [1] и породил уверенность в отсутствии металлического состояния в 1D системах, а также широкий всплеск активности в исследованиях таких систем, поскольку они должны были демонстрировать весьма экзотические свойства [2,3]. Для теоретического описания транспортных свойств таких систем было разработано несколько альтернативных подходов - метод реплик [4], метод трансфер-матриц [5,6], стохастические и ренорм-групповые методы [7,8] позволяющие в ряде случаев получить как качественное, так и количественное согласие с экспериментом. В то же время существование ряда органических материалов с высокой проводимостью и существенно одно- или квази-одномерным механизмом электронного транспорта заставил строить более сложные модели транспорта в таких средах. Одним из направлений здесь является разработка моделей квази-одномерных систем, а которых анизотропия поверхности Ферми велика, но конечна [9]. Вторым направлением являются модели коллективного транспорта, предложенные первоначально Пайерлсом в качестве механизма возникновения сверхпроводимости и впоследствии использованные для объяснения волн зарядовой плотности в 1D системах [3].

В последние годы в связи с усилившимся интересом к свойствам мезоскопических систем был достигнут существенный прогресс при описании не-Фермиевских свойств электронной жидкости [10], соотносимой с системами пониженной размерности в условиях малого числа атомов примеси. Здесь было показано, что соответствующая система может демонстрировать качества либо идеального проводника, либо изолятора, существенно завися от ряда внешних параметров [11].

Вторым интересным моментом, обуславливающим значительное повышение интереса к этим системам, являются результаты расчетов проводимости системы при приложении продольного внешнего поля [12]. При этом оказалось, что возможны ситуации частичной или полной делокализации состояний в системе, равно как и существенно нелинейный отклик системы на внешнее поле.

Рассматриваемые модели наряду со множеством достоинств имеют и один существенный недостаток, не позволяющий использовать их для описания эффектов локализации при наложении внешнего поперечного поля. Причиной является

трансляционная инвариантность системы в отсутствие поля. В предложенной нами ранее модели [13], основанной на использовании 1D многообразий вместо отрезков прямой, можно учесть такие эффекты как, например, влияние конформации полимерной цепи на проводимость образца в поперечном внешнем поле  $E$ . В пределе сильно вытянутых полимерных цепей в [13] было получено следующее выражение для проводимости системы

$$a = a_0 (1 - \epsilon \gamma(\epsilon, \dots))$$

указывающее на возможность управления проводимостью одномерного образца. При выводе этой формулы использовалось условие применимости WKB-приближения и было проведено усреднение как по примесям, так и по ансамблю возможных конформаций макромолекул в сильновытянутом полимерном образце.

Для получения более общих результатов, а также для возможности изучения влияния продольного поля была использована известная модель Кренига-Перри, обобщенная на учет эффектов продольного поля в [12], проводился расчет проводимости одномерной нити при заданной конформации молекулярной цепи.

Расчет проводимости образца выполнялся путем усреднения по гауссовой мере на пространстве конформаций [13]. Результаты расчетов усредненного коэффициента пропуска для нитей с конформацией

$$T(\epsilon) = \exp\{-\epsilon \int \sin(nhc / L) \dots\}$$

для некоторых  $\kappa$  в зависимости от энергии электрона и величины запирающего внешнего поля приведены на Рис. 1.

Из него видно, что эффект управление проводимостью имеет место при любых величинах продольного поля, причем при некоторых условиях он может приводить к полной локализации. Интересным представляется расчет соответствующих эффектов в условиях действительно сильных полей (вызывающих, например, полную делокализацию состояний в продольном пол. ^ ' ако соответствующее моделирование требует чрезвычайно больших временных затрат.

Заключая, можно сказать, что эффект управления проводимостью неупорядоченной одномерной системы с использованием поперечного внешнего поля подтвержден при численном моделировании с использованием обобщенной модели Кренига-Пенни, причем показано, что он имеет место и в условиях частичной делокализации электронных состояний в системе при приложении продольного поля.

**Список литературы**

- [1]. Anderson P.W. // Phys. Rev. 1958. 109. P.1492.
- [2]. Toombs A. //Phys. Rep. 1\*978. 40с. N 3. P. 182-240.
- [3]. Kagoshima S. et. al.// One-dimensional conductors. : Springer-Verlag. 1988
- [4]. Edwards S.F., Anderson P.W. // J. Phys. 1975. F5. P.965.
- [5]. Гоголин А.А. // ЖЭТФ.1975. No. 69. P. 327; Godolin A.A. // Phys. Rep. 1982.86. N 1. P. 3-53.
- [6]. Halperin B.// Phys. Rev. 1965. A139. P.104.
- [7]. Shapiro//Phys. Rev. 1986. B34. N 6. P.4394-4397.
- [8]. Саталин А.М. // ЖЭТФ. 1991. 100. N 3. P.1077-1078.
- [9]. Gogolin A.A. //Phys. Rep. 1988. 157. N 6. P.347-391.
- [10]. Fabrizio M., Gogolin A.O., Scheidl S. // Phys. Rev. Lett. 1994. 72. P.2235.
- [11]. Kane C.L., Fisher M.P.A. // Phys. Rev. V. 1992. P. 15233.
- [12]. Ouasti R, Zekri N, Brezini A, Depollier C //J. ofPhysics. Cond. Matt. 1995. 7. P. 811-820.
- [13]. Krylov G. // Advances in Synergetics. 1995. V. 7., P. 39. Minsk.

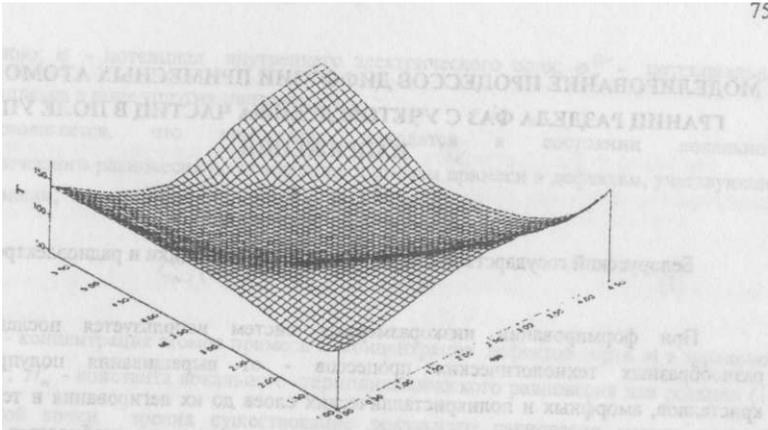


Рис. 1а ( $\kappa=1$ )

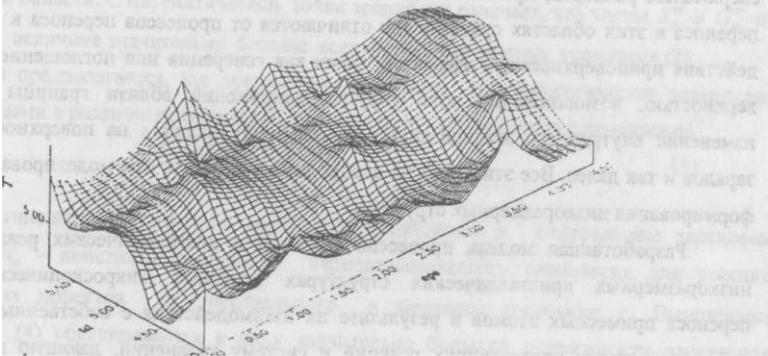


Рис. 1б ( $\kappa=4$ )

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДИФФУЗИИ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ ВБЛИЗИ ГРАНИЦ РАЗДЕЛА ФАЗ С УЧЕТОМ ДРЕЙФА ЧАСТИЦ В ПОЛЕ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ

**Квасов Н.Т., Величко О.И.**

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

При формировании низкоразмерных систем используется последовательность разнообразных технологических процессов - от выращивания полупроводниковых кристаллов, аморфных и поликристаллических слоев до их легирования и термообработок формируемых структур. При проведении всех этих процессов необходимо осуществлять строго контролируемый перенос примесных атомов и точечных дефектов в областях сверхмалых размеров, примыкающих к поверхности или границам раздела фаз. Процессы переноса в этих областях существенно отличаются от процессов переноса в объеме в силу действия приповерхностных эффектов, таких как генерация или поглощение дефектов поверхностью, возникновение поля упругих напряжений вблизи границы раздела фаз, изменение внутреннего электрического поля в силу наличия на поверхности связанных зарядов и так далее. Все эти эффекты необходимо учитывать при моделировании процессов формирования низкоразмерных структур.

Разработанная модель процессов переноса и квазихимических реакций частиц в низкоразмерных кристаллических структурах включает микроскопический механизм переноса примесных атомов в результате их взаимодействия с собственными точечными дефектами, схему протекающих реакций и систему уравнений, дающую количественное макроскопическое описание переноса и квазихимических реакций частиц.

Предполагается, что перенос примесных атомов осуществляется в результате образования, миграции и распада комплексов атом примеси - собственный точечный дефект в соответствии с реакцией



где  $A$  - атом примеси,  $D'_m$  - дефект сорта  $m$  в зарядовом состоянии  $z$ .

Уравнение диффузии комплексов  $(AD^m)$  имеет вид

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} + \nabla \cdot (f_1 v_c + \dots + v_g + \dots + \nabla \phi, \dots) \right) - S^* + G^* = 0, \quad (2)$$

где  $C^m$ ,  $DJ$  и  $\gamma^m$  - концентрация, коэффициент диффузии и заряд комплексов;  $S^*$  и  $G^*$  - скорости распада и генерации комплексов в единице объема полупроводника

соответственно;  $\varphi$  - потенциал внутреннего электрического поля;  $\Phi$  - потенциальная энергия комплекса в поле упругих напряжений.

**Предполагается, что комплексы находятся в состоянии локального термодинамического равновесия по отношению к атомам примеси и дефектам, участвующим в их образовании, т.е. выполняется закон действующих масс**

$$C_m / (C C_m) = K, \quad (3)$$

где  $C$  и  $C'_m$  - концентрация атомов примеси и концентрация дефектов сорта  $m$  в зарядовом состоянии  $z$ ;  $H'_m$  - константа локального термодинамического равновесия для реакции (1). С физической точки зрения существование локального равновесия между данными компонентами означает, что комплексы до распада совершают множество элементарных скачков, однако их средняя длина пробега существенно меньше минимального размера легированной области. С математической точки зрения это означает, что члены  $S^{*1}$  и  $G^{*1}$  по абсолютной величине значительно больше всех остальных членов уравнения (2).

Также предполагается, что существует локальное термодинамическое равновесие между частицами в различных зарядовых состояниях, т.е. справедливо соотношение

$$C^* J \{ C_m^x \} = K, \quad (4)$$

где  $C^*$  - концентрация дефектов сорта  $m$ , находящихся в нейтральном зарядовом состоянии;  $H'_m$  - константа локального термодинамического равновесия для реакции перехода этих дефектов из нейтрального в зарядовое состояние  $g$ . Выполнение соотношения (4) обеспечивается в силу значительно большей подвижности электронов (дырок) по отношению к подвижностям точечных дефектов и комплексов.

Используя уравнение (2) и соотношения (3), (4), из закона сохранения количества частиц можно получить уравнение диффузии атомов примеси, которое имеет вид

$$C_t = \nabla [ D \nabla (C C) + D C C \nabla X / X - v C C ], \quad (5)$$

где  $C = C^* / C^*$  - концентрация собственных точечных дефектов в нейтральном зарядовом состоянии, нормированная на термически равновесную концентрацию;  $D$  и  $v$  - эффективный коэффициент диффузии и эффективная скорость дрейфа атомов;

$X = p$  и  $X = 0$  в случае диффузии донорной, акцепторной и нейтральной примеси.

Результаты расчетов процессов переноса атомов кислорода при термообработке кристаллов кремния представлены на рис.1. Температура обработки 1500°C, время 15 с.

Значение собственного коэффициента диффузии для данной температуры равно  $0.016 \text{ мкм}^2/\text{с}$ .

Как видно из Рис. 1, процессы дрейфа комплексов в поле упругих напряжений могут существенно изменить вид профилей распределения атомов примеси.

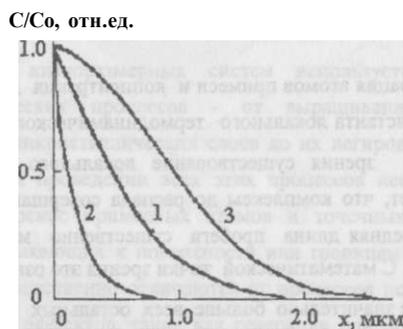


Рис. 1. Рассчитанное распределение атомов кислорода при диффузии из постоянного источника с концентрацией примеси у поверхности  $C_0$ ;

1 - расчет без учета дрейфа в поле упругих напряжений;

2 - при дрейфе в сторону поверхности; 3 - при дрейфе в объем

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КОГЕРЕНТНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ТРАНСПОРТА В НАНОСТРУКТУРАХ

Абрамов И.И., Данилюк А.Л., Новик Е.Г.

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

Поиск новых физических механизмов обработки информации в наноструктурах при комнатной температуре является в настоящее время крайне важной задачей. Перспективными для этой цели следует считать механизмы когерентного транспорта с самоорганизацией и одноэлектронное туннелирование.

В настоящей работе развит новый принцип когерентного электронного транспорта с самоорганизацией в наноструктурах с промежуточным полупроводником (MS) при комнатных температурах. Он формулируется следующим образом. Для существования когерентного транспорта в условиях хаотичности отдельных электронных переходов при повышенных температурах необходимо создание условий для самоорганизации электронного переноса по механизму накопления электронов в определенные промежутки времени на состояниях MS и их генерации на состояниях электродов в последующие промежутки времени. Указанная самоорганизация сопровождается возникновением незатухающих колебаний заряда на состояниях MS и тока через структуру. Для реализации этого принципа разработана достаточно общая модель электронного транспорта для наноструктур металл - диэлектрик - полупроводник - диэлектрик-полупроводник (SDSDS). Показано, что модель одноэлектронного переноса Лихарева является частным случаем предложенной модели. Из общей модели в первом приближении получена более простая модель когерентного транспорта в структуре металл - тонкий диэлектрик - полупроводник *p*-типа, возникающего в результате самоорганизации процессов переноса носителей заряда через состояния диэлектрика. В качестве первого приближения реализации полученной модели рассматривался электронный транспорт в указанной структуре при условии, что барьер на границе металл - диэлектрик низкий, плотность поверхностных состояний мала, диэлектрик содержит донорные и акцепторные зонные состояния. Ток в структуре определяется туннельными переходами носителей заряда через эти состояния и зоны полупроводника. Распределение заряда в диэлектрике моделируется заряженной плоскостью. Энергия акцепторных состояний при приложении постоянного внешнего потенциала соответствует запрещенной зоне полупроводника, а энергия донорных состояний валентной зоне.

В качестве примера рассмотрена структура Al-SiO<sub>2</sub>-p-Si при комнатной температуре. Концентрации дырок в объеме кремния  $2 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ , толщина диэлектрика 2,0 нм. Плотность

состояний в диэлектрике  $(1-6)10^{12}$  см<sup>-2</sup>. Высота барьера на границе металл-диэлектрик 3,2 эВ. Величина прямого постоянного вмещения 0,1-0,6 В. В зависимости от параметров структуры колебания характеризуются периодом  $10^{n6}$  -  $10^{n2}$  сек, а изменения относительной величины тока  $I/I_0$  составляют 40-70%, Рис.1. Проведено сравнение этой модели с известными экспериментальными данными, которые подтвердили ее справедливость.

Для частного случая (одноэлектронного туннелирования) были разработаны алгоритмы и программы, предназначенные для моделирования некоторых структур на основе этого эффекта.

Так, для структуры одноэлектронного транзистора в виде точечного проводящего "островка", соединенного с электродами посредством туннельных переходов, были разработаны алгоритмы и программы расчета геометрии и предельных параметров работы прибора. Эти программы позволяют рассчитать различные геометрические и электрические параметры и характеристики транзистора: радиус проводящего "островка", площади туннельных переходов, рабочую температуру, граничную частоту, емкости и проводимости туннельных переходов и другие. С использованием разработанных программ были проведены расчеты параметров и характеристик структуры для различных значений ширины и высоты барьера в туннельных переходах и коэффициента усиления по напряжению. Также были рассчитаны оптимальные геометрические размеры структуры на основе сферической модели прибора. На Рис.2 приведены результаты расчета зависимости рабочей температуры  $T_{01}$  и граничной частоты  $F_i$  от радиуса проводящего "островка"  $r$ , при значениях высоты туннельных барьеров  $\phi_0 = 2$  эВ, ширины туннельных барьеров  $d_s \cdot 3$  А и коэффициента усиления по напряжению  $V_{gaj_n} = 2,5$ .

Кроме того, были разработаны алгоритмы и программы расчета вольт-амперных характеристик для двойного туннельного перехода очень малых размеров с внешними цепями при нулевой температуре. С использованием этих программ были проведены расчеты для случая высокого и низкого импеданса.

Разработанные модели и программы могут быть использованы для проведения предварительных оценок параметров ряда нанозлектронных структур на эффектах когерентного транспорта с самоорганизацией и одноэлектронного туннелирования.

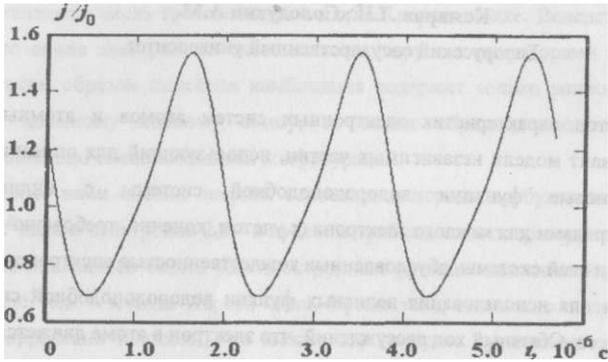


Рис.1. Колебания относительной плотности тока в структуре Al-SiO<sub>2</sub>-Si.

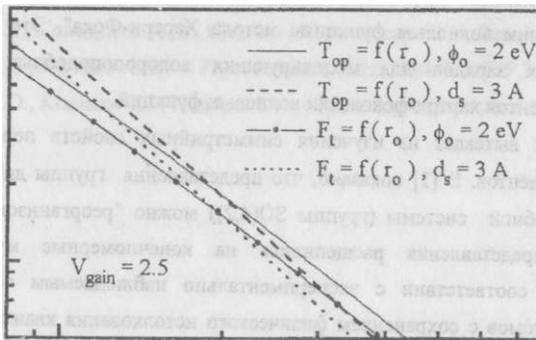


Рис.2. Зависимость рабочей температуры и граничной частоты от радиуса проводящего "островка" для различных значений высоты и ширины туннельных барьеров в одноэлектронном транзисторе.

## **О МОДЕЛИ НЕЗАВИСИМЫХ ЧАСТИЦ В РАСЧЕТАХ АТОМОВ И АТОМНЫХ КЛАСТЕРОВ**

«

**Комаров Л.И., Солодухин А.М.**

Белорусский государственный университет

Для расчетов характеристик электронных систем атомов и атомных кластеров предлагается вариант модели независимых частиц, использующий для описания состояний электронов волновые функции водородоподобной системы с индивидуальными эффективными зарядами для каждого электрона (с учетом, конечно, требований к симметрии волновой функции всей системы, обусловленных тождественностью электронов).

Основания для использования волновых функции водородоподобной системы вытекают из следующего. Обычный ход рассуждений, что электрон в атоме движется не только в поле ядра, но и в поле остальных электронов, вследствие чего для нахождения явного вида "наилучшей" волновой функции отдельного электрона необходимо решить уравнения Хартри-Фока, ведет к кажущемуся весьма правдоподобным заключению, что такие волновые функции будут значительно отличаться от волновых функций водородоподобной системы.

Однако в работах [1,2] показано, что "водородоподобные волновые функции с должным образом определенным эффективным зарядом являются удивительно хорошим приближением к наилучшим волновым функциям метода Хартри-Фока". Это следует из вычисления эффективных зарядов для моделирующих водородоподобных волновых функций из значений моментов хартри-фовских волновых функций.

Другой аргумент вытекает из изучения симметричных свойств периодической системы химических элементов. В [3] показано, что представления группы динамической симметрии водородоподобной системы (группы  $SO(4,2)$ ) можно "реорганизовать" таким образом, чтобы эти представления расщепились на конечномерные мультиплеты, находящиеся в полном соответствии с экспериментально наблюдаемым содержанием электронных оболочек атомов с сохранением физического истолкования квантовых чисел, определяющих состояния отдельных электронов.

При конкретном использовании для расчетов характеристик атомов и атомных кластеров волновых функций водородоподобной системы с индивидуальными эффективными зарядами для каж., :о электрона первая требующая решения задача - построение по возможности простого алгоритма для построения волновой функции многоэлектронной системы с правильными свойствами симметрии относительно перестановок электронных координат. Эта задача решается следующим образом. Берется произведение одноэлектронных волновых функций, зависящих от пространственных

координат электронов, и одной из функций, являющейся собственной для оператора полного спина электронной системы. Этот объект подвергается действию операторов перестановок электронов и результаты складываются с коэффициентами +1 или -1 в зависимости от четности или нечетности числа транспозиций в данной перестановке. Вследствие того, что оператор полного спина электронной системы коммутирует с операторами перестановок, получающаяся таким образом линейная комбинация содержит только волновые функции, принадлежащие заданному полному спину, и, таким образом, представляет собой правильную комбинацию смешивающихся конфигураций.

Проведенные нами оценки энергий основных и первых возбужденных состояний атомов и ионов с числом электронов 2,3,4 в нулевом приближении операторного метода [4,5] с использованием описанного базиса одноэлектронных функций показывают, что точность этих оценок выше, чем в методе Хартри-Фока. Кроме того, несколько экспериментов по учету угловой корреляции показали, что можно эту точность существенно повысить без большого увеличения объема необходимых расчетов.

#### Список литературы

1. Kregar M. //Physica Scripta. 1984. V. 29. P. 438-47.
2. Kregar M. //Physica Scripta. 1985. V. 31, P. 246-54.
3. Комаров Л.И., Солодухин А.М., Цветков И.В. // Вестр. БГУ, Сер. I. 1994. N 2, С. 3-8.
4. Feranchuk I.D., Komarov L.I.//J. Phys. A: Math. Gen. 1984. V. 17. P.3111-33.
5. Feranchuk I.D., Komarov L.I., Nichipor I.V., Ulyanenko A.P. // Ann. Phys. (NY). 1995. V.238. P.370-440.

## СОДЕРЖАНИЕ

КОНЦЕПЦИЯ МЕЖВУЗОВСКОЙ ПРОГРАММЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ "ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОЛУЧЕНИЯ, ДИАГНОСТИКИ, ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ И ПРИМЕНЕНИЯ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И СИСТЕМ"

КРАТКИЙ ОТЧЕТ О ВЫПОЛНЕНИИ МЕЖВУЗОВСКОЙ ПРОГРАММЫ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ МИНИСТЕРСТВА ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ "ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ ПОЛУЧЕНИЯ, ДИАГНОСТИКИ, ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ И ПРИМЕНЕНИЯ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ И СИСТЕМ" ЗА 1996 ГОД

Потоцкий **И.В.**, Подденежный Е.Н. МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР, ПОЛУЧАЕМЫХ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ МЕТОДОМ

Говор Л.В., Бутылина И.Б., Башмаков И.А., Григорьева И.М., Ксеневич В.К., Самуилов В.А. ФОРМИРОВАНИЕ И ИЗУЧЕНИЕ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР

Бобрович О.Г., Тульев В.В., Ташлыков И.С. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ УСКОРЕННЫХ ИОНОВ Ag CO СТРУКТУРАМИ Co/Si ПРИ ИОННО-АССИСТИРОВАННОМ НАНЕСЕНИИ ТОНКИХ ПЛЁНОК КОБАЛЬТА НА КРЕМНИЙ

Воробьева С.А., Зубко В.И., Лесникович А.И., Мушинский В.В., Сицко Г.Н., Собаль Н.С., Холмецкий А.Л. ИССЛЕДОВАНИЕ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ЖИДКОСТЕЙ НА ОСНОВЕ  $Fe_3O_4$  ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИМ МЕТОДОМ И МЕТОДОМ ЯДЕРНОГО ГАММА-РЕЗОНАНСА

Башмаков И.А., Стельмах **В.Ф.**, Стригуцкий Л.В. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА С Фуллереноподобными углеродными структурами.

Зайцев М.А., Лобан В.А., Эпштейн О.Л., Хмельницкий А.И., Куликович О.Г., Черкевич С.Н. МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИМЕРАМИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ ПРОВОДИМОСТИ ПЛОСКИХ БИСЛОЙНЫХ ЛИПИДНЫХ МЕМБРАН

Зорина Т.Е. Михаловский **И.С.** Зорин **В.П.** МЕХАНИЗМЫ СТРУКТУРНО-ЗАВИСИМОЙ РЕГУЛЯЦИИ ФОТОХИМИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ТЕТРАПИРРОЛЬНЫХ ПИГМЕНТОВ В УНИЛАМЕЛЛЯРНЫХ ЛИПИДНЫХ ВЕЗИКУЛАХ

Драко В.М., Углов В.В., Ходасевич В.В. НАКОПЛЕНИЕ ИМПЛАНТИРОВАННОГО АРГОНА В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ И ФОРМИРОВАНИЕ ПОРОВЫХ СИСТЕМ

Явид **В.Ю.**, Якубеня С.Н., Петров **В.В.**, Шамас Х.А., Харченко Т.Д. ХАОТИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕКОМБИНАЦИОННО-АКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ В ОСОБО ЧИСТОМ ГЕРМАНИИ

Вариченко **В.С.**, Зайцев А.М., Мартинович В.А., Русецкий М.С., Ленина Н.М. ТРЕКООБРАЗОВАНИЕ В АЛМАЗЕ И КРЕМНИИ, ОБЛУЧЕННЫХ ИОНАМИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

Мельников А.А., Филипп А.Р. ИНЖЕКЦИОННЫЕ ТОКИ В АЛМАЗЕ