

RESURS MARKA
123
УФР



ISSN 1025-8817
Published from 1957

**ЎЗБЕКISTON FIZIKA JURNALI
УЗБЕКСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ
UZBEK JOURNAL OF PHYSICS**

2021

**Volume 23
Number 2**

ISSN 1025-8817 (Print)

ISSN 2181-077X(Online)

Академия Наук Республики Узбекистан

УЗБЕКСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Том 23, Апрель-Июнь, № 2, 2021

Журнал основан в 1957 году

Учредитель: Академия Наук Республики Узбекистан

Издается на базе Института ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова АН РУз

СОДЕРЖАНИЕ

Ж.М. Ганиев. Природа мелкомасштабных мод колебаний в дискообразных галактиках	1
М.М. Собиров, Ж.Ю. Розиков, В.У. Рузибоев. Поляризационные характеристики диффузно отраженного и проходящего излучения в среде с конечной оптической толщиной	11
Б.Т. Абдулазизов. Температурная зависимость химического потенциала и заселенности уровня Ландау двумерного электронного газа в постоянном магнитном поле	21
П.Б. Парчинский, А.А. Насиров, А.С. Газирулина, А. Арсланов, Dojin Kim, О.М. Турсункулов. Анизотропия транспортных и магнитотранспортных свойств эпитаксиальных слоев GaMnAs, полученных методом низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии	27
М.Ю. Ташметов, И.И. Юлдашева. Влияние высокоэнергичного электронного облучения и радиационных дефектов на структуру однослойных углеродных нанотрубок	33
Р.Р. Жалолов, Б.Н. Рустамова, Ш.З. Уролов, З.Ш. Шаймарданов. Влияние размера ZnO наноструктур на их фотолюминесцентные свойства	40
А.А. Шерниезов, Ш.Д. Пайзиев, Ф.А. Шерматова, Ш.А. Бегимкулов, А.Г. Каххоров, Ф.М. Камолиддинов, А.Г. Алибоев. Экспериментальное исследование эффективности солнечных лазеров с многократной накачкой	45
Б.Э. Эшпулатов, Д.Ш. Хужанова, А.Ш. Хужанов. Особенности размерно-фононного поглощения света в цилиндрических проволоках	48

Н.М. Мустафоева, А.К. Ташатов. Морфология, состав и структура поверхности пленок NiSi_2/Si , полученных методом твердофазной эпитаксии	55
Б.М. Абдурахманов, С.Р. Бойко, Х.Б. Ашуров, Ш.К. Кучканов. Оптимизация процессов газофазного получения кремниевых и кремний-германиевых пленок	61
Э.А. Захидов, И.И. Тажибаев, Л.Р. Нурумбетова, Ш.К. Нематов, В.О. Кувондинов, И.Р. Бойназаров, Ф.М. Рузиев. Разработка гибких органических солнечных элементов на основе тиено[2,3-f]бензофурана и тиенопирролдiona	67
Н.Ф. Бункин, Л.М. Сабиров, В.А. Козлов, Й.Т. Жураев, Х.С. Хайдаров. Исследование набухания полимерных мембран в кювете ограниченного размера с помощью Фурье ИК-спектроскопии	74
С.З. Мирзаев, К.Б. Эгамбердиев, Б.А. Аллаев, О.В. Трунилина, С.К. Теляев. Влияние наночастиц SiO_2 на фазовую устойчивость функциональных полиэлектролитов	81

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

- Б.Ж. Ахмедов**, д.ф.м.н., Астрономический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан, тел. +998 97 708 80 68, ahmedov@astrin.uz - главный редактор
- М.Ш. Курбанов**, д.т.н., Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, тел. +998 97 752 14 85, kurbanov@iplt.uz - зам.главного редактора
- Ф.Т. Умарова**, к.ф.м.н., Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, тел. +998 90 325 15 31, umarova_inp@mail.ru - ответственный секретарь
- Ф.Х. Абдуллаев**, д.ф.м.н., Физико-технический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан, fatkhulla@yahoo.com
- М.Х. Ашуров**, акад., «Фонон», Ташкент, Узбекистан, ashurov49@mail.ru
- Х.Б. Ашуров**, д.т.н., Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, ashurov@iplt.uz
- С.А. Бахрамов**, акад., Академия наук РУз, Ташкент, Узбекистан, bahramov@mail.ru
- М.К.С. Бахадирханов**, акад., проф. Технического университета РУз, Ташкент, Узбекистан, bahazeb@yandex.ru
- Р.А. Ганеев**, д.ф.м.н., Воронежский государственный университет, Россия, rashid_ganeev@mail.ru
- С.В. Гарнов**, проф. Директор Института общей физики им. Прохорова, Москва, Россия, garnov@kapella.gpi.ru
- К.Г. Гуламов**, акад., Физико-технический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан, gulamov@uzsci.net
- А. Джурахалов**, д.ф.м.н., BDC Benelux, Бельгия, dzhurakhalov@mail.ru
- А.А. Захидов**, проф., Техасский университет, Даллас, США, zakhidov@utdallas.edu
- Э.М. Ибрагимова**, д.ф.м.н., Институт ядерной физики АН РУз, Узбекистан, ibragimova@inp.uz
- К.К. Кадиржанов**, проф. Евразийского национального университета им. Л.Н. Гумилева, Нур Султан, kadyrzhanov1945@gmail.com
- Д.И. Казаков**, д.ф.м.н., Директор Боголюбовской лаборатории теоретической физики, Дубна, kazakovd@theor.jinr.ru
- Т. Казино** Toshitaka, проф., Национальная астрономическая обсерватория, Япония, kajino@nao.ac.jp
- С. Кивалов**, Doctor Sc., Государственный университет, Олбани, Нью Йорк, США, skivalov@albany.edu
- А.П. Кузнецов**, д.ф.м.н., Национальный исследовательский ядерный университет, Россия, APKuznetsov@merphi.ru
- Г. Лубатти**, проф. Вашингтонского университета, США, lubatti@uw.edu

Н.Т. огли Мамедов, акад., Директор Института физики Национальной академии Азербайджана, director@physics.ab.az

З.А. Мансуров, проф., Институт проблем горения, Казахстан, ZMansurov@kaznu.kz

С.З. Мирзаев, д.ф.м.н., Академия наук РУз, Узбекистан, mirzaev@web.de

К.М. Мукимов, акад., Национальный университет РУз, Ташкент, Узбекистан, kmukimov@mail.ru

Р.А. Муминов, акад., Физико-технический институт АН РУз, Ташкент, Узбекистан, detector@uzsci.net

Т.М. Муминов, акад., Национальный университет РУз, Ташкент, Узбекистан, kholbaev-ik@mail.ru

М.М. Мусаханов, акад., Национальный университет РУз, Ташкент, Узбекистан, yousufmm@list.ru

А.И. Никифоров, д.ф.м.н., Институт физики полупроводников им. Ржанова, Сибирское отделение РАН, nikif@isp.nsc.ru

С. Ниномия, PhD, Университет Яманашии, Япония, sninomiya@yamanashi.ac.jp

Б.Л. Оксенгендлер, д.ф.м.н., Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, oksengendlerbl@yandex.ru

В.А. Орлович, акад., Институт физики Национальной Академии наук, Беларусь, v.orlovich@dragon.bas-net.by

В.Я. Панченко, акад., Председатель Chairman of the board RFBR, Москва, Россия, vpanch@rfbr.ru

Л. Реззола, проф., Директор Института теоретической физики, Франкфурт, Германия, rezzolla@itp.uni-frankfurt.de

Л.М. Сабиров, д.ф.м.н., Самаркандский университет, Самарканд, Узбекистан, sabirov@gmail.com

Г.Ф. Смут, проф., Калифорнийский университет, США, <gfsmoot@lbl.gov>

М. Ж. Soileau, проф., вице-президент Научного Университета, Флорида, MJ@ucf.edu

М.Ю. Ташметов, д.ф.-м.н., Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент, Узбекистан, mannab@inp.uz

Ф.Ф. Умаров, проф., Казахско-Британский технический университет, Казахстан, farid1945@yahoo.com

Т.Б. Усманов, акад., Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент, Узбекистан, timurbek_usmanov@mail.ru

И.Г. Хидиров, д.ф.-м.н., Институт ядерной физики АН РУз, Узбекистан, khidirov@inp.uz

А.М. Шалагин, акад., Институт автоматики и электрометрии, Новосибирск, Россия, shalagin@iae.nsc.ru

И.А. Щербаков, акад., Институт общей физики им. Прохорова, Москва, Россия, ivan@kapella.gpi.ru

Ш.А. Эгамбердиев, акад., Астрономический институт АН РУз, Узбекистан, shuhrat@astrin.uz

Б.С. Юлдашев, акад., Академия наук РУз, Ташкент, Узбекистан, yuldbekh@gmail.com

Издание зарегистрировано Агентством по печати и информации Республики Узбекистан 22.12.2006.

Регистрационный номер 0045

Набор и верстка выполнены в редакции журнала «Узбекский физический журнал»

Подписано в печать 10.10.2021. Формат 60×84 $\frac{1}{8}$. Усл. печ. л. 8,0. Уч. изд. л. 8,63. Тираж 128. Заказ № 7921683

Адрес редакции: Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова АН РУз, Мирзо Улугбекский р-н, ул. Дўрмон йўли, 33, 100125, Ташкент, Узбекистан

Тел.: 998-71-262-31-82, +998903251531, Fax: 998-71-262-31-83

Отпечатано: ООО «Poligraphic Technology»

Ташкент, ул. Катта Миробод, 1-тор, 18А. Тел.: 90-926-25-26

ISSN 1025-8817 (Print)

ISSN 2181-077X(Online)

Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan

UZBEK JOURNAL OF PHYSICS

Volume 23, Number 2, April-June, 2021

Journal is founded in 1957 year

Founder: Academy of Sciences of Republic of Uzbekistan

Journal is published in the Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan

CONTENTS

J.M. Ganiev. The nature of small-scale oscillation modes in disk-like galaxies	1
M.M. Sobirov, J.Yu. Rozikov and V.U. Ruziboev. The polarization characteristics of diffusively transmitted and diffusively reflected radiation in medium with a finite optical thickness	11
B.T. Abdulazizov. The temperature dependence of the chemical potential and the population of the Landau levels of two dimensional electron gas in constant magnetic field	21
P.B. Parchinskiy, A.A. Nasirov, A.S. Gazizulina, A. Arslanov, Dojin Kim, O.M. Tursunkulov. Anisotropy of transport and magnetotransport properties of GaMnAs epitaxial layers obtained by low-temperature molecular beam epitaxy	27
M.Yu. Tashmetov, I.I. Yuldashova. Single-walled carbon nanotube structure and radiation defects under the high energy electron beam ...	33
R.R. Jalolov, B.N. Rustamova, Sh.Z. Urolov, Z.Sh. Shaymardanov. The influence of size on the photoluminescence properties of ZnO nanostructures	40
A.A. Sherniyozov, Sh.D. Payziyev, F.A. Shermatova, Sh.A. Begimkulov, A.G. Qahhorov F.M. Kamoliddinov, A.G. Aliboyev. Experimental study of the efficiency of a multi-pass pumping scheme for solar lasers	45
B.E. Eshpulatov, D.Sh. Khuzhanova, A.Sh. Khuzhanov. Features of size-phonon absorption of light in cylindrical wires	48

N.M. Mustafoeva, A.K. Tashatov. Morphology, composition and surface structure of NiSi ₂ /Si films obtained by solid-phase epitaxy	55
B.M. Abdurakhmanov, S.P. Boyko, Kh.B. Ashurov, Sh.K. Kuchkanov. Optimization of the processes of gas-phase production of silicon and silicon-germanium films	61
E.A. Zakhidov, I.I. Tajibaev, A.A. Saparbaev, Sh.K. Nematov, V.O. Kuvondikov, I.R. Boynazarov, F.M. Ruziev. Development of flexible organic solar cells based on thieno[2,3-f]benzofuran and thienopyrroldione	67
N.F. Bunkin, L.M. Sabirov, V.F. Kozlov, Y.T. Juraev, Kh.S. Khaydarov. Investigation of the swelling of polymer membranes in a cuvette of limited size using Fourier transform infrared spectrometry	74
S.Z. Mirzaev, K.B. Egamberdiev, B.A. Allaev, O.V. Trunilina, S.K. Telaev. Influence of SiO ₂ nanoparticles on the polyelectrolyte anti-adhesive compound phase stability	81

EDITORIAL BOARD

- B.J. Ahmedov**, Prof., Ulughbeg Astronomical Institute, Uzbek Academy of Sciences, Tashkent, Uzbekistan, tel. +99897-7088068, ahmedov@astrin.uz – editor-in-chief
- M.Sh. Kurbanov**, doct. tech. sc., Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan, Tashkent, tel. +99897 752 14 85, kurbanov@iplt.uz – deputy of editor-in-chief
- F.T. Umarova**, PhD, Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan, Tashkent, tel. +998 90 325 15 31, umarova_inp@mail.ru – responsible secretary
- F.Kh. Abdullaev**, Prof., Physical-Technical Institute of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, fatkhulla@yahoo.com
- M.Kh. Ashurov**, Acad., "Fonon", Tashkent, Uzbekistan, ashurov49@mail.ru
- Kh.B. Ashurov**, Prof., Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan, ashurov@iplt.uz
- S.A. Bahramov**, acad., Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, bahramov@mail.ru
- M.K.S. Bahadirhanov**, acad., Technical University, Tashkent, Узбекистан, bahazeb@yandex.ru
- R.A. Ganeev**, Prof., Voronezhskiy Gosudarstvenniy Universitet, Russia, rashid_ganeev@mail.ru
- S.V. Garnov**, Doctor Sc., Prof., Director of Prokhorov General Physics Institute, Russia, Moscow, garnov@kapella.gpi.ru
- K.G. Gulamov**, Acad., Physical-Technical Institute of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, gulamov@uzsci.net
- A. Dzhurakhalov**, Prof. BDC Benelux, Belgium, dzhurakhalov@mail.ru
- A.A. Zakhidov**, Prof., University of Texas at Dallas, Dallas, USA, zakhidov@utdallas.edu
- E.M. Ibragimova**, Prof., Institute of Nuclear Physics of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, ibragimova@inp.uz
- K.K. Kadirjanov**, Prof., The Eurasian National University L.N. Gumilyov, Nur Sultan, kadyrzhhanov1945@gmail.com
- D.I. Kazakov**, Doctor Sc., Corresponding Member of RAS, Director of Bogoliubov laboratory of theoretical physics, Dubna, kazakovd@theor.jinr.ru
- Toshitaka Kajino**, д-р, проф., National Astronomical Observatory of Japan, kajino@nao.ac.jp
- S. Kivalov**, Doctor Sc., Albany State University of New York, USA, skivalov@albany.edu
- A.P. Kuznetsov**, Doctor Sc., National Research Nuclear University MPhI, Russia, +7903-6613049, APKuznetsov@merphi.ru
- H. Lubatti**, Prof., University of Washington, lubatti@uw.edu

N.T.O. Mamedov, acad., Director of the Institute of Physics National Academy of Azerbaijan, director@physics.ab.az
Z.A. Mansurov, Doctor Sc., Prof., Combustion Problems Institute, Kazakhstan, ZMansurov@kaznu.kz
S.Z. Mirzaev, Prof., Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, mirzaev@web.de
K.M. Mukimov, acad., National University of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, kmukimov@mail.ru
R.A. Muminov, acad., Physical-Technical Institute of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, detector@uzsci.net
T.M. Muminov, acad., National University of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, kholbaev-ik@mail.ru
M.M. Musahanov, acad., National University of Uzbekistan, Tashkent, Uzbekistan, yousufmm@list.ru
A.I. Nikifirov, Doctor Sc., Rzhannov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch of RAN, nikif@isp.nsc.ru
Satoshi Ninomiya, PhD, University of Yamanashi, Japan, sninomiya@yamanashi.ac.jp
B.L. Oksengendler, Prof., Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan, Tashkent, oksengendlerbl@yandex.ru
V.A. Orlovich, acad., B.I. Stepanov Institute of Physics of the NAS, Belarus, v.orlovich@dragon.bas-net.by
V.Ya. Panchenko, acad., Chairman of the board RFBR, Moscow, Russia, vpanch@rfbr.ru
L. Rezzolla, Prof., The Director of the Institute of Theoretical Physics, Frankfurt, Germany, rezzolla@itp.uni-frankfurt.de
L.M. Sabirov, Prof., Samarkand University, Uzbekistan, sabirov@gmail.com
G.F. Smoot, Prof., University of California, CITA, George F Smoot III, <gfsmoot@lbl.gov>
M.J. Soileau, Prof., Vice-President of the University of Florida for Science, MJ@ucf.edu
M.Yu. Tashmetov, Prof., Institute of Nuclear Physics of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, mannab@inp.uz
F.F. Umarov, Prof., Kazakh-British Technical University, Kazakhstan, farid1945@yahoo.com
T.B. Usmanov, acad., Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of UAS, Tashkent, timurbek_usmanov@mail.ru
I.G. Khidirov, Prof., Institute of Nuclear Physics of the UAS, Tashkent, Uzbekistan, khidirov@inp.uz
A.M. Shalagin, acad., Institute of Automation and Electrometry, S.B. R.A.Sc., Novosibirsk, Russia, shalagin@iae.nsc.ru
I.A. Sherbakov, acad. Prokhorov General Physics Institute, Russia, ivan@kapella.gpi.ru
Sh.A. Egamberdiev, acad., Ulughbeg Astronomical Institute, Uzbek Academy of Sciences, Tashkent, Uzbekistan, shuhrat@astrin.uz
B.S. Yuldashev, acad., Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, Tashkent, yuldbekh@gmail.com

Journal is registered by Agency on press and information of Republic of Uzbekistan in 22.12.2006.

Registration number 0045

Typesetting and makeup are made in editorial office of Uzbek Journal of Physics

Passed for printing 10.10.2021. Dimension of paper 60×84¹/₈. Conventional printed sheet 8,0. Calculation publishing sheet 8,63. An edition of 128 copies. Order list № 7921683

Address of editorial office: Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Academy of Sciences of Uzbekistan, M. Ulugbek region, Dormon street 33, 100125 Tashkent, Uzbekistan

Tel.: 998-71-262-31-82, +998-90-3251531, Fax: 998-71-262-31-83

Printed: OOO «Poligraphic Technology»

Tashkent, Катта Миробод 1-топ, 18А. Tel. 90-926-25-26.

Природа мелкомасштабных мод колебаний в дискообразных галактиках

Ж.М. Ганиев*, С.Н. Нуритдинов

Национальный университет РУз, Вузгородок, ул. Университетская 4, 100176, Ташкент, Узбекистан

Получена 25.06.2020

* Corresponding author: e-mail ganiev_jakhongir@mail.ru, Phone: +998 97 735 08 40

В данной работе рассмотрена природа поведения мелкомасштабных мод возмущения в дискообразных моделях спиральных галактик. Проведены расчеты гравитационной неустойчивости горизонтальных мелкомасштабных мод возмущений, таких как $(m;N)=(12;20)$ (14;20), (16;20) и (18;20), на фоне нелинейно неравновесной пульсирующей анизотропной модели самогравитирующего диска. Для каждой из этих мод возмущений построены критические диаграммы между вириальным параметром и степенью вращения, а также вычислены и сравниваются инкременты неустойчивостей при различных значениях параметра вращения. Результаты расчетов и сравнений областей неустойчивостей показывают, что с ростом степени мелкомасштабности область неустойчивостей сужается по мере увеличения азимутального волнового числа m , кроме мод возмущения $(m;N)=(14;20)$. В критических диаграммах, кроме случая $(m;N)=(18;20)$, наблюдается небольшая область устойчивости. В интервале параметра вращения $\Omega \in [0.2-1.0]$ кривые моды возмущений (12;20), (14;20) и (16;20) пересекаются друг с другом при некоторых значениях инкремента неустойчивостей. Мода возмущения (14;20) становится самой важной, начиная с параметра вращения $\Omega = 0.6$.

Ключевые слова: нелинейно-нестационарные модели, самогравитирующий диск, гравитационная неустойчивость, мелкомасштабные моды возмущений.

In this paper, the nature of behavior of small-scale perturbation modes in disc-like galaxies is considered. The gravitational instabilities of horizontal small-scale perturbation modes, such as $(m;N)=(12;20)$ (14;20), (16;20) and (18;20) are calculated on the background of a nonlinear nonequilibrium pulsating anisotropic model of a self-gravitating disk. For each of these perturbation modes the critical diagrams between the virial parameter and the rotation degree are constructed, and instability increments for different values of the rotation parameter were calculated and compared. The results of calculations and comparisons of instability regions show that with increasing the small-scale degree, the instability region decreases respectively to the azimuthal wave number (except for case the mode $m;N=14;20$). In critical diagrams, except for the case $(m;N) = (18;20)$, a small area of stability exist. In the interval $\Omega \in [0.2-1.0]$ the curves of the perturbation modes (12;20), (14;20) and (16;20) intersects with each other at some values of the instability increment and the perturbation mode (14;20) became the most important starting from $\Omega = 0.6$.

Keywords: nonlinear non-stationary models, self-gravitating disks, gravitational instability, small-scale perturbation modes.

<https://doi.org/10.52304/v23i2.233>

I. Введение

Изучение неустойчивостей дискообразных

моделей самогравитирующих систем представляет большой интерес не только для галактических,

но и для изучения различных аккреционных дисков [1-7].

Структура дискообразных галактик довольно многообразна, в них наблюдаются как крупномасштабные образования, так и различные мелкомасштабные. Мелкомасштабными образованиями галактик являются рассеянные звездные скопления (РЗС), молекулярные облака (МО), газо-пылевые туманности и др. Процессы формирования указанных образований и соответствующих им первоначальных протооблаков можно объяснить частично неустойчивостями конкретных мод возмущений, так как одним из основных физических механизмов происхождения этих структур в галактиках и ряде других дискообразных самогравитирующих системах является именно гравитационная неустойчивость [8-11].

Гравитационное взаимодействие между разными частями системы сжимает вещество. Этот процесс называют гравитационной или джинсовской неустойчивостью. Она приводит к перераспределению массы, т.е. в одной области системы плотность растет, в другой области соответственно уменьшается [12].

В работах [13, 14] были вычислены умеренно мелкие ($N=10$; $m=4, 6, 8$) моды для «горячих» твердотельно-вращающихся дисков на основе равновесной модели Бисноватого-Когана и Зельдовича [15]. Получены точные характеристические уравнения для собственных частот и явные выражения для собственных функций. Найдены решения не только для мелкомасштабных, но также и крупномасштабных возмущений, и не только для «почти холодных» (с орбитами, близкими к круговым), но и для «горячих» систем, в которых радиальные и круговые скорости частиц одного порядка. Однако, эти неустойчивости исследовались только для строго равновесного состояния самогравитирующего диска.

II. Цель данной работы

Наблюдаемые структурные образования в дискообразных самогравитирующих системах формируются в период нелинейно-нестационарной стадии эволюции галактик.

В [16-19] авторами построены нелинейно нестационарные модели диска с изотропной и анизотропной диаграммами скоростей. Исследованы интересные типы неустойчивостей для горизонтальных и вертикальных крупномасштабных мод возмущений на фоне нелинейно нерав-

новесной модели самогравитирующего диска с целью исследования природы крупномасштабных структурных образований. Также там получены критические зависимости, характеризующие происхождение этих структурных образований.

Как мы отметили выше, с точки зрения наиболее мелкомасштабных мод возмущений основными структурными образованиями дискообразных подсистем галактик считаются РЗС и МО. Они определяют глобальное строение диска галактик. Однако до сих пор отсутствует анализ проблем их происхождения в дискообразных системах, в частности, для нашей Галактики, не выполнен. В связи с этим возникает ряд новых вопросов. Можно ли объяснить их глобальное распределение соответствующей теорией формирования? Не ясно, при каких физических условиях в дискообразных системах могут формироваться эти объекты, и каковы характерные времена этих явлений?

Целью данного подхода является поиск мод колебаний, ответственных за образование РЗС или МО, и полагаясь на них, сформулировать основы новой теории их происхождения в дискообразных галактиках. Исследование строения этих дисков требует отдельного анализа мелкомасштабных мод возмущения на фоне радиально пульсирующей неравновесной модели самогравитирующего диска.

В работе [20] Нуриддиновым была впервые создана нелинейно-нестационарная модель бесстолкновительного самогравитирующего диска. Для случая анизотропной нелинейной модели Нуриддинов вывел нестационарное дисперсионное уравнение (НДУ) в общем виде для пульсирующей модели бесстолкновительного самогравитирующего диска.

III. Пульсирующая анизотропная модель

В основе данной модели находится известная изотропная нелинейно-пульсирующая модель Нуриддинова [20].

$$\Psi(r, v_r, v_\perp, t) = \frac{\sigma_0}{2\pi\Pi\sqrt{1-\Omega^2}} \times \left[\frac{1-\Omega^2}{\Pi^2} \left(1 - \frac{r^2}{\Pi^2} \right) - (v_r - v_a)^2 - (v_\perp - v_b)^2 \right]^{-1/2} \chi(R-r) \quad (1)$$

Здесь $\sigma_0 = \sigma(0;0)$, Ω – безразмерный параметр, характеризующий степень вращения твердотель-

ного диска $0 \leq \Omega \leq 1$. v_r и $v_\perp$ – радиальная и тангенциальная скорости частиц, функция $\Pi(r)$ имеет смысл коэффициента растяжения и $\Pi(r) = 1 + \lambda \cos \psi (1 - \lambda^2)^{-1}$, $r = (\psi + \lambda \sin \psi)(1 - \lambda^2)^{-3/2}$. Модель пульсирует с амплитудой $\lambda = 1 - (2T/|U|)_0$, где $(2T/|U|)_0$ является вириальным параметром.

С помощью (1) можно построить анизотропную модель, усреднив фазовую плотность по параметру вращения Ω

$$\Psi_{\text{anis}} = \int_{-1}^{+1} \Psi_{\text{isot}} \rho(\Omega) d\Omega. \quad (2)$$

Здесь $\rho(\Omega)$ – весовая функция от Ω . Легко построить анизотропную модель, беря весовую функцию в виде $\rho(\Omega) = 2/\pi(1 - \Omega^2)^{1/2}$. После интегрирования и некоторых преобразований получим нелинейно пульсирующую модель с анизотропной диаграммой скоростей:

$$\Psi_{\text{anis}} = \frac{\sigma_0}{\pi} [1 + \Omega(xv_y - yv_x)] \chi \times \\ \times ((1 - r^2/\Pi^2)(1 - \Pi^2 v_\perp^2) - \Pi^2(v_r - v_a)^2) \quad (3)$$

Далее нами найдено нестационарное дисперсионное уравнение (НДУ) модели (3). Оно имеет следующий вид:

$$a_{\text{anis}}(\Psi) = \frac{4}{N(N^2 - 1)\Pi^3} \gamma_{Nm}(N - 1) \times \\ \times (N^2 + N - m^2) \overline{D}_N + i\Omega m(N^2 + N - m^2) d_N \quad (4)$$

Здесь $\gamma_{Nm} = \frac{(N + m - 1)!!(N - m - 1)!!}{(N + m)!!(N - m)!!}$,

$$\overline{D}_N = \int_{-\infty}^{\Psi} E W^{N-1} \frac{dP_N}{d(\cosh)} d\psi_1, \quad d_N = \int_{-\infty}^{\Psi} E I_N d\psi_1,$$

$$E = \Pi^3(\psi_1) S(\psi, \psi_1) a(\psi_1),$$

$$I_N = W^{N-1} \left[\frac{1}{N+2} \frac{d^2 P_{N+1}}{d(\cosh)^2} - \frac{P_N}{d(\cosh)} \right] \tanh,$$

$$W = \frac{1 + \lambda \cos \psi_1}{1 + \lambda \cos \psi},$$

$P_N(\cosh)$ – полином Лежандра, N, m – радиальное и азимутальное волновые числа.

IV. Результаты расчетов

На основе полученного НДУ (4) мы изучили ряд конкретных мелкомасштабных мод возмущений для пульсирующей модели диска: $(m; N) = (12; 20), (14; 20), (16; 20)$ и $(18; 20)$. Нами построены критические диаграммы “вириальный параметр–степень вращения” для каждой из этих мод и вычислены соответствующие инкременты неустойчивостей.

Например, НДУ для случая $m=12; N=20$ имеет следующий вид:

$$a(\psi)_{12;20} = \frac{1}{(1 + \lambda \cos \psi)^{41}} K_{12;20}(l_\tau), \quad (5) \\ \tau = 0.19$$

здесь

$$l_\tau(\psi) = \int_{-\infty}^{\Psi} \Pi^3(\psi_1) S(\psi, \psi_1) D(\psi_1) (\lambda + \cos \psi)^{m-1-\tau} \sin^\tau \psi_1 d\psi_1,$$

где λ – амплитуда пульсации диска, выражение для $K_{12;20}$ дано в приложении.

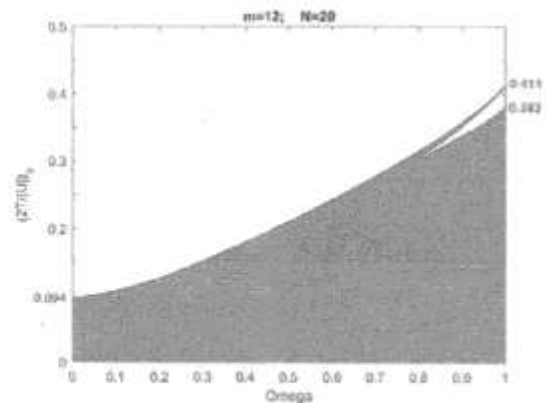


Рисунок 1. Критическая зависимость вириального отношения от параметра вращения для $N=20; m=12$.

Численный расчет НДУ показывает, что для моды колебания $m=12; N=20$ неустойчивость начинается со значения вириального параметра $(2T/|U|)_0 \approx 0.094$ и доходит до 0.413. Между значениями $(2T/|U|)_0 \approx 0.413 + 0.382$ имеется область устойчивости (рис. 1).

Для моды колебания $m=14, N=20$ расчет НДУ показывает, что неустойчивость начинается со значения вириального параметра $(2T/|U|)_0 \approx$

0.089 и доходит до 0.431. Между значениями $(2T/|U|)_0 \approx 0.386 \div 0.395$ имеется небольшая область устойчивости, а между значением $(2T/|U|)_0 \approx 0.401 \div 0.431$ наблюдается явно заметный остров устойчивости (рис. 2).

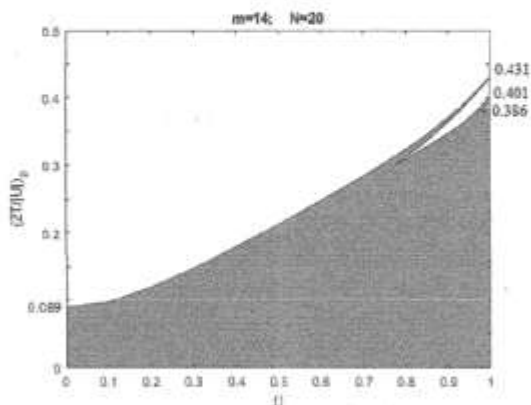


Рисунок 2. Критическая зависимость вириального отношения от параметра вращения для $N=20$, $m=14$.

В третьем случае ($m=16$, $N=20$) неустойчивость начинается со значения вириального параметра $(2T/|U|)_0 \approx 0.076$ и доходит до 0.397. Между значениями $(2T/|U|)_0 \approx 0.369 \div 0.394$ наблюдается другой остров устойчивости (рис. 3).

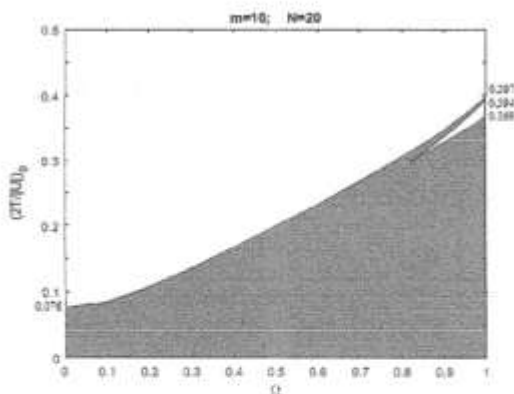


Рисунок 3. Критическая зависимость вириального отношения от параметра вращения для $m=16$; $N=20$.

Неустойчивость в четвертом случае ($m=18$, $N=20$) начинается от значения вириального параметра $(2T/|U|)_0 \approx 0.056$ и доходит до 0.312. В этом случае вообще не наблюдается острова устойчивости, как в первых трех случаях (рис. 4).

Заштрихованные зоны на рисунках 1-4 определяют области неустойчивости. Следовательно, для фиксированного N при росте значения m

область неустойчивости сужается и постепенно остров устойчивости может исчезнуть.

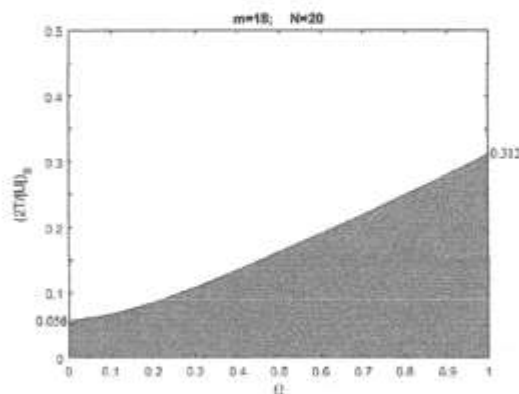


Рисунок 4. Критическая зависимость вириального отношения от параметра вращения для $m=18$; $N=20$.

Из рисунков видно, что по мере роста скорости вращения модели происходит рост области неустойчивости. С ростом же степени мелкомасштабности область неустойчивости сужается.

Нами также вычислены и сравниваются инкременты неустойчивостей мелкомасштабных мод колебаний для различных значений параметра вращения (рис. 5).

На рис. 5 представлены инкременты неустойчивостей всех мелкомасштабных мод колебаний при различных значениях параметра вращения. Когда система не вращается кривые инкрементов неустойчивостей изученных мод возмущений расположены в порядке убывания параметра m , т.е. с увеличением значения азимутального волнового числа инкремент неустойчивости уменьшается. Такое поведение инкремента наблюдается только при значении параметра вращения системы $\Omega = 0.0$.

Когда система имеет вращение, т.е. в интервале параметра вращения $\Omega \in [0.2 \div 1.0]$ моды возмущений (12; 20), (14; 20) и (16; 20) пересекаются друг с другом, сливаясь при некоторых значениях инкремента неустойчивостей, а мода возмущения (14; 20) имеет наибольшее значение инкремента, начиная со значения параметра вращения $\Omega > 0.6$. Надо отметить, что с ростом степени вращения значения инкрементов также растут.

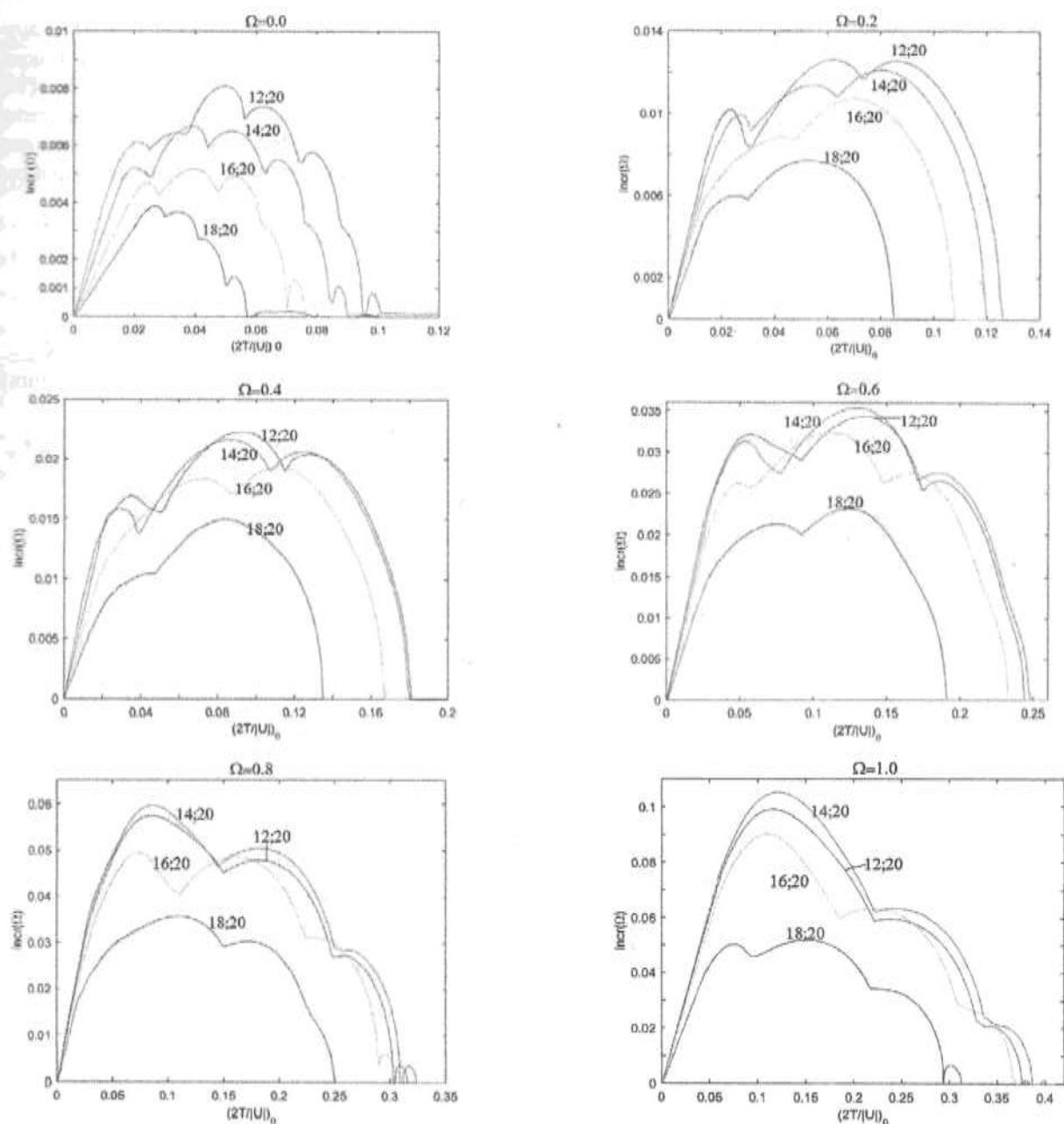


Рисунок 5. Сравнение инкрементов неустойчивостей всех мелкомасштабных мод колебаний для различных значений параметра вращения.

V. Заключение

Выполнены расчеты гравитационных неустойчивостей для мод возмущений $(m; N) = (12; 20)$, $(14; 20)$, $(16; 20)$ и $(18; 20)$. Построены диаграммы критической зависимости вириального

отношения от параметра вращения, сравниваются инкременты неустойчивостей мелкомасштабных мод колебаний для различных значений параметра вращения. Из рис. 1-4 видно, что по мере роста скорости вращения модели всегда происходит

рост области неустойчивостей. В случае $m=18$; $N=20$ не наблюдается острова устойчивости, в остальных случаях можно явно наблюдать такой остров.

Сравнение инкрементов неустойчивостей (рис. 5) показывает, что когда система не вращается, кривые инкрементов неустойчивостей расположены в порядке убывания параметра m . Когда система вращается, т.е. в интервале параметра

вращения $\Omega \in [0.2 - 1.0]$, моды возмущений (12; 20), (14; 20) и (16; 20) пересекаются друг с другом, сливаясь при некоторых значениях инкремента неустойчивостей. Мода возмущения (14; 20) имеет самое большое значение инкремента, начиная со значения параметра вращения $\Omega = 0.6$. С ростом степени вращения значения инкрементов также растут.

Приложение. Расчет величины $K_{12,20}$.

(Подставляем все выражения для функций в (4) и вычисляем поэтапно каждую из них)

$$K_{12,20} = \frac{30705345}{120259084288} [779((43648605/128c^7e^{12}b^{12} + 210c^{19} + 72747675/16384c^3e^{16}b^{16} - 101846745/128c^9e^{10}b^{10} + 101745c^{15}e^4b^4 + 27776385/32c^{11}e^8b^8 - 17955/2c^{17}e^2b^2 - 3561075/8c^{13}e^6b^6 - 130945815/2048c^5e^{14}b^{14} - 4849845/65536ce^{18}b^{18})I_0 + (-101846745/8e^8b^7c^{12} + 16787925/4e^6b^5c^{14} + 1120314195/64c^{10}e^{10}b^9 + 480134655/32768e^{18}b^{17}c^2 - 800224425/2048e^{16}b^{15}c^4 + 21945e^2bc^{18} + 3360942585/1024e^{14}b^{13}c^6 - 4849845/65536e^{20}b^{19} - 1440403965/128c^8e^{12}b^{11} - 1119195/2e^4b^3c^{16})I_1 + (951615c^{17}e^4b^2 + 24923353455/2048e^{16}b^{14}c^5 - 129243519405/2048e^{14}b^{12}c^7 + 567431865/4c^9e^{12}b^{10} - 17955/2c^{19}e^2 - 18804612645/128c^{11}e^{10}b^8 - 112021245/8e^6b^4c^{15} + 557664345/8c^{13}e^8b^6 - 56612240685/65536e^{18}b^{16}c^3 + 480134655/32768e^{20}b^{18}c)I_2 + (41410215/2c^{16}e^6b^3 + 92345898645/4096c^4e^{18}b^{15} - 377545883715/2048e^{16}b^{13}c^6 + 312567660405/512e^{14}b^{11}c^8 - 116032541625/128c^{10}e^{12}b^9 + 9879134265/16c^{12}e^{10}b^7 - 1473979815/8e^8b^5c^{14} - 1119195/2e^4bc^{18} - 56612240685/65536e^{20}b^{17}c^2 + 72747675/16384e^{22}b^{19})I_3 + (4057895835/16c^{15}e^8b^4 - 5068345066785/16384c^5e^{18}b^{14} + 6356560895685/4096e^{16}b^{12}c^7 - 6844814191215/2048e^{14}b^{10}c^9 + 92345898645/4096c^3e^{20}b^{16} + 418252837275/128c^{11}e^{12}b^8 + 101745c^{19}e^4 - 91464786945/64c^{13}e^{10}b^6 - 112021245/8e^6b^2c^{17} - 800224425/2048e^{22}b^{18}c)I_4 + (60359305545/32e^{10}b^5c^{14} - 5068345066785/16384c^4e^{20}b^{15} + 20061466289865/8192c^6e^{18}b^{13} - 15947672565825/2048e^{16}b^{11}c^8 + 24923353455/2048e^{22}b^{17}c^2 + 11235631061655/1024e^{14}b^9c^{10} - 445957797285/64c^{12}e^{12}b^7 - 1473979815/8e^8b^3c^{16} + 16787925/4e^6bc^{18} - 130945815/2048e^{24}b^{19})I_5 + (71662361085/8c^{13}e^{12}b^6 - 377545883715/2048e^{22}b^{16}c^3 + 20061466289865/8192c^5e^{20}b^{14} - 193475919001365/16384c^7e^{18}b^{12} + 3360942585/1024e^{24}b^{18}c + 49577467764825/2048e^{16}b^{10}c^9 - 45518078720205/2048e^{14}b^8c^{11} - 91464786945/64c^{15}e^{10}b^4 + 557664345/8c^{17}e^8b^2 - 3561075/8c^{19}e^6)I_6 + (43648605/128e^{26}b^{19} + 7193712040515/256c^{12}e^{14}b^7 - 129243519405/2048e^{24}b^{17}c^2 + 6356560895685/4096e^{22}b^{15}c^4 - 193475919001365/16384c^6e^{20}b^{13} + 146612477846835/4096c^8e^{18}b^{11} - 97410839120595/2048e^{16}b^9c^{10} - 445957797285/64c^{14}e^{12}b^5 + 9879134265/16c^{16}e^{10}b^3 - 101846745/8e^8bc^{18})I_7 + (487779442306065/8192c^{11}e^{16}b^8 + 312567660405/512e^{24}b^{16}c^3 - 15947672565825/2048e^{22}b^{14}c^5 + 146612477846835/4096c^7e^{20}b^{12} - 1440403965/128e^{26}b^{18}c - 2271939876841635/32768c^9e^{18}b^{10} - 45518078720205/2048e^{14}b^6c^{13} + 418252837275/128c^{15}e^{12}b^4 - 18804612645/128c^{17}e^{10}b^2 + 27776385/32c^{19}e^8)I_8 +$$

$$\begin{aligned}
& + (1415489617707165 / 16384c^{10}e^{18}b^9 + 567431865 / 4e^{26}b^{17}c^2 - 6844814191215 / 2048e^{24}b^{15}c^4 + \\
& + 49577467764825 / 2048e^{22}b^{13}c^6 - 2271939876841635 / 32768c^8e^{20}b^{11} - 97410839120595 / 2048e^{16}b^7c^{12} + \\
& + 11235631061655 / 1024e^{14}b^5c^{14} - 116032541625 / 128c^{16}e^{12}b^3 - 101846745 / 128e^{28}b^{19} + \\
& + 1120314195 / 64c^{18}e^{10}b)I_9 + (1415489617707165 / 16384c^9e^{20}b^{10} - 116032541625 / 128e^{26}b^{16}c^3 + \\
& + 11235631061655 / 1024e^{24}b^{14}c^5 - 97410839120595 / 2048e^{22}b^{12}c^7 - 2271939876841635 / 32768c^{11}e^{18}b^8 + \\
& + 49577467764825 / 2048e^{16}b^6c^{13} - 6844814191215 / 2048e^{14}b^4c^{15} + 567431865 / 4c^{17}e^{12}b^2 - \\
& - 101846745 / 128c^{19}e^{10} + 1120314195 / 64e^{28}b^{18}c)I_{10} + (487779442306065 / 8192c^8e^{22}b^{10} + \\
& + 418252837275 / 128e^{26}b^{15}c^4 - 45518078720205 / 2048e^{24}b^{13}c^6 - 2271939876841635 / 32768c^{10}e^{20}b^9 - \\
& - 1440403965 / 128c^{18}e^{12}b + 146612477846835 / 4096c^{12}e^{18}b^7 - 15947672565825 / 2048e^{16}b^5c^{14} + \\
& + 312567660405 / 512e^{14}b^3c^{16} - 18804612645 / 128e^{28}b^{17}c^2 + 27776385 / 32e^{30}b^{19})I_{11} + (43648605 / 128c^{19}e^{12} + \\
& + 7193712040515 / 256c^7e^{24}b^{12} - 445957797285 / 64e^{26}b^{14}c^5 - 97410839120595 / 2048e^{22}b^{10}c^9 + \\
& + 146612477846835 / 4096c^{11}e^{20}b^8 - 193475919001365 / 16384c^{13}e^{18}b^6 + 6356560895685 / 4096e^{16}b^4c^{15} - \\
& - 129243519405 / 2048e^{14}b^2c^{17} + 9879134265 / 16e^{28}b^{16}c^3 - 101846745 / 8e^{30}b^{18}c)I_{12} + \\
& + (71662361085 / 8c^6e^{26}b^{13} - 45518078720205 / 2048e^{24}b^{11}c^8 + 49577467764825 / 2048e^{22}b^9c^{10} + \\
& + 3360942585 / 1024e^{14}b^7c^{18} - 193475919001365 / 16384c^{12}e^{20}b^7 + 20061466289865 / 8192c^{14}e^{18}b^5 - \\
& - 377545883715 / 2048e^{16}b^3c^{16} - 91464786945 / 64e^{28}b^{15}c^4 + 557664345 / 8c^2e^{30}b^{17} - 3561075 / 8e^{32}b^{19})I_{13} + \\
& + (60359305545 / 32e^{28}b^{14}c^5 - 445957797285 / 64e^{26}b^{12}c^7 + 11235631061655 / 1024e^{24}b^{10}c^9 + \\
& + 24923353455 / 2048e^{16}b^2c^{17} - 15947672565825 / 2048e^{22}b^8c^{11} + 20061466289865 / 8192c^{13}e^{20}b^6 - \\
& - 5068345066785 / 16384c^{15}e^{18}b^4 - 1473979815 / 8e^{30}b^{16}c^3 + 16787925 / 4e^{32}b^{18}c - 130945815 / 2048c^{19}e^{14})I_{14} + \\
& + (4057895835 / 16c^4e^{30}b^{15} + 418252837275 / 128e^{26}b^{11}c^8 + 92345898645 / 4096c^{16}e^{18}b^3 - \\
& - 6844814191215 / 2048e^{24}b^9c^{10} + 6356560895685 / 4096e^{22}b^7c^{12} - 5068345066785 / 16384c^{14}e^{20}b^5 - \\
& - 91464786945 / 64e^{28}b^{13}c^6 - 112021245 / 8e^{32}b^{17}c^2 + 101745e^{34}b^{19} - 800224425 / 2048e^{16}b^4c^{18})I_{15} + \\
& + (41410215 / 2c^3e^{32}b^{16} - 116032541625 / 128e^{26}b^{10}c^9 + 312567660405 / 512e^{24}b^8c^{11} - \\
& - 377545883715 / 2048e^{22}b^6c^{13} + 92345898645 / 4096c^{15}e^{20}b^4 + 9879134265 / 16e^{28}b^{12}c^7 - 1119195 / 2e^{34}b^{18}c - \\
& - 1473979815 / 8e^{30}b^{14}c^5 - 56612240685 / 65536e^{18}b^2c^{17} + 72747675 / 16384c^{19}e^{16})I_{16} + (951615c^2e^{34}b^{17} + \\
& + 567431865 / 4e^{26}b^9c^{10} - 129243519405 / 2048e^{24}b^7c^{12} + 24923353455 / 2048e^{22}b^5c^{14} - \\
& - 18804612645 / 128e^{28}b^{11}c^8 - 17955 / 2e^{36}b^{19} - 112021245 / 8e^{32}b^{15}c^4 + 557664345 / 8c^6e^{30}b^{13} - \\
& - 56612240685 / 65536e^{20}b^3c^{16} + 480134655 / 32768e^{18}b^1c^{18})I_{17} + (16787925 / 4e^{32}b^{14}c^5 - 101846745 / 8e^{30}b^{12}c^7 \\
& + 3360942585 / 1024e^{24}b^6c^{13} - 800224425 / 2048e^{22}b^4c^{15} + 1120314195 / 64e^{28}b^{10}c^9 + \\
& + 480134655 / 32768e^{20}b^2c^{17} + 21945e^{36}b^{18}c - 1440403965 / 128e^{26}b^8c^{11} - 4849845 / 65536c^{19}e^{18} - \\
& - 1119195 / 2e^{34}b^{16}c^3)I_{18} + (210e^{38}b^{19} - 101846745 / 128e^{28}b^9c^{10} + 101745e^{34}b^{15}c^4 + 27776385 / 32e^{30}b^{11}c^8 - \\
& - 17955 / 2e^{36}b^{17}c^2 - 3561075 / 8e^{32}b^{13}c^6 - 130945815 / 2048e^{24}b^5c^{14} + 43648605 / 128e^{26}b^7c^{12} - \\
& - 4849845 / 65536e^{20}b^3c^{18} + 72747675 / 16384e^{22}b^1c^{16})I_{19} + 2608i\Omega e((-305540235 / 2048e^{12}b^{13}c^6 - \\
& - 1995 / 2bc^{18} - 43648605 / 65536e^{16}b^{17}c^2 + 130945815 / 256e^{10}b^{11}c^8 - 1526175 / 8e^4b^5c^{14} - \\
& - 101846745 / 128e^8b^9c^{10} + 101745 / 4e^2b^3c^{16} + 9258795 / 16e^6b^7c^{12} + 72747675 / 4096e^{14}b^{15}c^4 + \\
& + 440895 / 131072e^{18}b^{19})I_0 + (-107544465 / 16c^{13}e^6b^6 + 1805465025 / 128c^{11}e^8b^8 - 3477338865 / 256c^9e^{10}b^{10} + \\
& + 5397877485 / 65536c^3e^{16}b^{16} - 182971425 / 131072ce^{18}b^{18} + 1995 / 2c^{19} - 377055 / 4c^{17}e^2b^2 - \\
& - 4757697945 / 4096c^5e^{14}b^{14} + 12352555215 / 2048c^7e^{12}b^{12} + 10886715 / 8c^{15}e^4b^4)I_1 + (-13125105 / 4e^4b^3c^{16} + \\
& + 377055 / 4e^2bc^{18} - 94673824245 / 1024c^8e^{12}b^{11} + 113966507655 / 4096e^{14}b^{13}c^6 - 27804161385 / 8192e^{16}b^{15}c^4 + \\
& + 35311721445 / 256c^{10}e^{10}b^9 + 456936795 / 16e^6b^5c^{14} - 3027625965 / 32e^8b^7c^{12} - 43648605 / 65536e^{20}b^{19} +
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +17011051785/131072e^{18}b^{17}c^2)_2 + (-910922985/16e^6b^4c^{15} + 13125105/4e^{17}e^4b^2 - 1355478329205/4096e^{14}b^{12}c^7 + \\
& +734504175405/1024e^9e^{12}b^{10} - 624776873175/131072e^{18}b^{16}c^3 + 537794462205/8192e^{16}b^{14}c^5 - 181153614915/256e^{11}e^{10}b^8 + \\
& +10038670425/32e^{13}e^8b^6 - 101745/4e^{19}e^2 + 5397877485/65536e^{20}b^{18}c)_3 + (-36011930535/64e^8b^5c^{14} + 910922985/16e^{16}e^6b^3 - \\
& -6457301876025/2048e^{10}e^{12}b^9 + 9067517554095/4096e^{14}b^{11}c^8 - 11315478909735/16384e^{16}b^{13}c^6 + \\
& +2841078440655/32768e^4e^{18}b^{15} - 27804161385/8192e^{20}b^{17}c^2 + 260186689035/128e^{12}e^{10}b^7 - 10886715/8e^4bc^{18} + \\
& +72747675/4096e^{22}b^{19})_4 + (36011930535/64e^{15}e^8b^4 - 437433194205/128e^{13}e^{10}b^6 + 16976779693965/2048e^{11}e^{12}b^8 - \\
& -36376092677925/4096e^{14}b^{10}c^9 + 70102234897695/16384e^{16}b^{12}c^7 - 28796615589105/32768e^5e^{18}b^{14} + \\
& +537794462205/8192e^3e^{20}b^{16} - 4757697945/4096e^2b^{18}c - 456936795/16e^6b^2c^{17} + 1526175/8e^{19}e^4)_5 + \\
& +(-6848147357415/512e^{12}e^{12}b^7 + 437433194205/128e^{10}b^5c^{14} - 305540235/2048e^{24}b^{19} + \\
& +90588503960955/4096e^{14}b^9c^{10} - 133892925160995/8192e^{16}b^{11}c^8 + 174186589920525/32768e^6e^{18}b^{13} - \\
& -11315478909735/16384e^4e^{20}b^{15} + 113966507655/4096e^{22}b^{17}c^2 - 10038670425/32e^8b^3c^{16} + 107544465/16e^6bc^{18})_6 + \\
& +(-142481264361345/4096e^{14}b^8c^{11} + 6848147357415/512e^{13}e^{12}b^6 + 323723094429735/8192e^{16}b^{10}c^9 - \\
& -655162385283315/32768e^7e^{18}b^{12} + 70102234897695/16384e^5e^{20}b^{14} - 1355478329205/4096e^{22}b^{16}c^3 + \\
& +12352555215/2048e^{24}b^{18}c - 260186689035/128e^{15}e^{10}b^4 - 9258795/16e^{19}e^6 + 3027625965/32e^{17}e^8b^2)_7 + \\
& +(-2008258828631055/32768e^{16}b^9c^{10} + 142481264361345/4096e^{12}e^{14}b^7 - 16976779693965/2048e^{14}e^{12}b^5 + \\
& +3138386978624625/65536e^8e^{18}b^{11} - 133892925160995/8192e^6e^{20}b^{13} + 9067517554095/4096e^{22}b^{15}c^4 - \\
& -94673824245/1024e^{24}b^{17}c^2 + 181153614915/256e^{16}e^{10}b^3 + 130945815/256e^{26}b^{19} - 1805465025/128e^8bc^{18})_8 + \\
& +(-4845557363581935/65536e^9e^{18}b^{10} + 2008258828631055/32768e^{11}e^{16}b^8 + 6457301876025/2048e^{15}e^{12}b^4 - \\
& -90588503960955/4096e^{14}b^6c^{13} + 323723094429735/8192e^7e^{20}b^{12} - 36376092677925/4096e^{22}b^{14}c^5 + \\
& +734504175405/1024e^{24}b^{16}c^3 - 35311721445/256e^{17}e^{10}b^2 - 3477338865/256e^{26}b^{18}c + 101846745/128e^{19}e^8)_9 + \\
& +(-2008258828631055/32768e^8e^{20}b^{11} + 4845557363581935/65536e^{10}e^{18}b^9 - 734504175405/1024e^{12}e^{12}b^3 + \\
& +36376092677925/4096e^{14}b^5c^{14} - 323723094429735/8192e^{16}b^7c^{12} + 90588503960955/4096e^{22}b^{13}c^6 - \\
& -6457301876025/2048e^{24}b^{15}c^4 + 3477338865/256e^{18}e^{10}b + 35311721445/256e^{26}b^{17}c^2 - 101846745/128e^{28}b^{19})_{10} + \\
& +(-142481264361345/4096e^2b^{12}c^7 + 2008258828631055/32768e^9e^{20}b^{10} + 94673824245/1024e^{17}e^{12}b^2 - \\
& -9067517554095/4096e^{14}b^4c^{15} + 133892925160995/8192e^{16}b^6c^{13} - 3138386978624625/65536e^{18}e^{18}b^8 + \\
& +16976779693965/2048e^{24}b^{14}c^5 - 181153614915/256e^{26}b^{16}c^3 - 130945815/256e^{19}e^{10} + 1805465025/128e^{28}b^{18}c)_{11} + \\
& +(-6848147357415/512e^{24}b^{13}c^6 + 142481264361345/4096e^8e^{22}b^{11} - 12352555215/2048e^{18}e^{12}b + \\
& +1355478329205/4096e^{14}b^3c^{16} - 70102234897695/16384e^{16}b^5c^{14} + 655162385283315/32768e^{12}e^{18}b^7 - \\
& -323723094429735/8192e^{10}e^{20}b^9 + 260186689035/128e^{26}b^{15}c^4 + 9258795/16e^{30}b^{19} - 3027625965/32e^{28}b^{17}c^2)_{12} + \\
& +(-437433194205/128e^{26}b^{14}c^5 + 6848147357415/512e^7e^{24}b^{12} + 305540235/2048e^{19}e^{12} - 113966507655/4096e^{14}b^2c^{17} + \\
& +11315478909735/16384e^{16}b^4c^{15} - 174186589920525/32768e^{13}e^{18}b^6 + 133892925160995/8192e^{11}e^{20}b^8 - \\
& -90588503960955/4096e^{22}b^{10}c^9 + 10038670425/32e^{28}b^{16}c^3 - 107544465/16e^{30}b^{18}c)_{13} + (437433194205/128e^6e^{26}b^{13} - \\
& -36011930535/64e^{28}b^{15}c^4 + 4757697945/4096e^{14}bc^{18} - 537794462205/8192e^{16}b^3c^{16} + 28796615589105/32768e^{14}e^{18}b^3 - \\
& -70102234897695/16384e^{12}e^{20}b^7 + 36376092677925/4096e^{22}b^9c^{10} - 16976779693965/2048e^{24}b^{11}c^8 + 456936795/16e^2e^{30}b^{17} - \\
& -1526175/8e^{32}b^{19})_{14} + (-910922985/16e^{30}b^{16}c^3 + 36011930535/64e^{28}b^{14}c^5 + 27804161385/8192e^{16}b^2c^{17} - \\
& -2841078440655/32768e^{15}e^{18}b^4 + 11315478909735/16384e^{13}e^{20}b^6 - 9067517554095/4096e^{22}b^8c^{11} + \\
& +6457301876025/2048e^{24}b^{10}c^9 - 260186689035/128e^{26}b^{12}c^7 + 10886715/8e^{32}b^{18}c - 72747675/4096e^{19}e^{14})_{15} + \\
& +(-13125105/4e^{32}b^{17}c^2 + 910922985/16e^4e^{30}b^{15} - 537794462205/8192e^{14}e^{20}b^5 + 624776873175/131072e^{16}e^{18}b^3 - \\
& -734504175405/1024e^{24}b^9c^{10} + 1355478329205/4096e^{22}b^7c^{12} + 181153614915/256e^{26}b^{11}c^8 - 10038670425/32e^{28}b^{13}c^6 + \\
& +101745/4e^{34}b^{19} - 5397877485/65536e^{16}bc^{18})_{16} + (-377055/4e^{34}b^{18}c + 13125105/4e^3e^{32}b^{16} + 3027625965/32e^{28}b^{12}c^7 + \\
& +27804161385/8192e^{15}e^{20}b^4 - 113966507655/4096e^{22}b^6c^{13} + 94673824245/1024e^{24}b^8c^{11} - 35311721445/256e^{26}b^{10}c^9 -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -456936795/16e^{30}b^{14}c^5 + 43648605/65536e^{19}c^{16} - 17011051785/131072e^{18}b^2c^{17})l_{17} + (-1805465025/128e^{28}b^{11}c^8 + \\
& + 107544465/16e^6e^{30}b^{13} - 5397877485/65536e^{20}b^3c^{16} + 4757697945/4096e^{22}b^5c^{14} + 3477338865/256e^{26}b^9c^{10} + \\
& + 182971425/131072e^{18}bc^{18} + 377055/4e^2e^3b^{17} - 1995/2e^{36}b^{19} - 12352555215/2048e^{24}b^7c^{12} - 10886715/8e^{32}b^{15}c^4)l_{18} + \\
& + (1995/2e^{36}b^{18}c - 130945815/256e^{26}b^8c^{11} + 1526175/8e^{32}b^{14}c^3 + 101846745/128e^{28}b^{10}c^9 - 101745/4e^{34}b^{16}c^3 - \\
& - 9258795/16e^{30}b^{12}c^7 - 72747675/4096e^{22}b^4c^{15} + 305540235/2048e^{24}b^6c^{13} - 440895/131072e^{19}c^{18} + \\
& + 43648605/65536e^{20}b^2c^{17})l_{19})]
\end{aligned}$$

$$b = \sin \psi, \quad c = \lambda + \cos \psi, \quad e = \sqrt{1 - \lambda^2}.$$

Метаданние

The nature of small-scale oscillation modes in disk-like galaxies

J.M. Ganiev, S.N. Nuritdinov

National University of Uzbekistan, University Town, Universitetskaya str. 4, 100176, Tashkent, Uzbekistan

In this paper, the nature of behavior of small-scale perturbation modes in disc-like galaxies is considered. The gravitational instabilities of horizontal small-scale perturbation modes, such as $(m;N)=(12;20)$, $(14;20)$, $(16;20)$ and $(18;20)$ are calculated on the background of a nonlinear nonequilibrium pulsating anisotropic model of a self-gravitating disk. For each of these perturbation modes the critical diagrams between the virial parameter and the rotation degree are constructed, and instability increments for different values of the rotation parameter were calculated and compared. The results of calculations and comparisons of instability regions show that with increasing the small-scale degree, the instability region decreases respectively to the azimuthal wave number (except for case the mode $m;N=14;20$). In critical diagrams, except for the case $(m;N) = (18;20)$, a small area of stability exist. In the interval $\Omega \in [0.2-1.0]$ the curves of the perturbation modes $(12;20)$, $(14;20)$ and $(16;20)$ intersects with each other at some values of the instability increment and the perturbation mode $(14;20)$ became the most important starting from $\Omega = 0.6$.

Keywords: nonlinear non-stationary models, self-gravitating disks, gravitational instability, small-scale perturbation modes

Литература (References)

- [1] G. Lodato. *Nuovo Cimento Rivista Serie* **30**, 293 (2007).
- [2] T. Paneque-Carreno, L.M. Perez, et. al. *ApJ* **914**, Issue 2, 88 (2021).
- [3] K. Kratter, G. Lodato. *Annual Review of Astronomy and Astrophysics* **54**, 271-311 (2016).
- [4] D. Forgan, K. Rice, et. al. *MNRAS* **410**, Issue 2, 994-1006 (2011).

- [5] W. Bethune, H. Latter and W. Kley. *Astronomy and Astrophysics* **650**, 20 (2021).
- [6] K. Rice. *Publications of the Astronomical Society of Australia (PASA)* **33**, 11 (2016).
- [7] G. Lodato. *Advances in Astronomy* **2012**, 1 (2012).
- [8] L. Mayer, T. Peters et. al. *The ApJ Letters* **823**, Issue 2, 7 (2016).
- [9] S. Inoue, N. Yosida. *MNRAS* **474**, Issue 3, 3466-3487 (2018).
- [10] P. Sharma. *Astrophysics and Space Science* **361**, 10 (2016).
- [11] M. Roshan, S. Raxvar. *ApJ* **872**, Issue 1, 12 (2019).
- [12] A.M. Fridman, A.V. Xoperskov. *Fizika galakticheskikh diskov* (Fizmatlit, 2011).
- [13] A.J. Kalnajs. *ApJ* **175**, 63 (1972).
- [14] A.M. Fridman, V.L. Polyachenko, *Physics of Gravitating Systems* (Springer-Verlag, New-York, II, 1984).
- [15] G.S. Bisnovatyj-Kogan, Ya.B. Zel'dovich. *Astrofizika* **6**, 387-396 (1970).
- [16] S.N. Nuritdinov, K.T. Mirtadjiyeva, Mariam Sultana. *Astrofizika* **51**, 487 (2008).
- [17] S.N. Nuritdinov, K.T. Mirtadjiyeva, Ikbol Axmad, J.K. Ruzibayev. *Astrofizika* **52**, 643 (2009).
- [18] K.T. Mirtadjiyeva, S.N. Nuritdinov, J.K. Ruzibayev, Muxammad Xalid. *Astrofizika* **54**, 213 (2011).
- [19] K.T. Mirtadjiyeva, S.N. Nuritdinov. *Astrofizika* **55**, 611 (2012).
- [20] S.N. Nuritdinov. *Nelineynie modeli i fizika neustoychivosti neravnovesnykh besstolknovitelnykh samogravitiruyushikh system*. Avtoreferat disser. na sois. uch. st. dok. fiz.-mat. nauk (Sankt-Peterburg, 1993).

Дисксимон галактикаларда майда масштабли тебраниш модаларининг табиати

Ж.М. Ганиев, С.Н. Нуритдинов

Ўзбекистон Миллий университети, Талабалар шаҳарчаси, Университет кўчаси, 4-уй, Тошкент, Ўзбекистон

Ушбу ишда, дисксимон галактикаларда майда масштабли тебраниш модаларининг табиати ўрганилди. Майда масштабли горизонтал тебраниш модалари $(m;N)=(12;20)$, $(14;20)$, $(16;20)$ ва $(18;20)$ қийматлари учун ўзгравитацияланувчи дискнинг

ночизикли ностационар анизотроп пульсацияланувчи модели фонида гравитацион бекарорликлари ҳисоб-китоблари амалга оширилди. Ушбу ғалаёнланиш модаларининг ҳар бири учун вириал параметр ва айланиш даражаси орасида критик диаграммалар тузилди. Шу билан бирга бекарорлик инкрементлари ҳисобланди ва айланиш параметрининг турли хил қийматларида ўзаро солиштирилди. Ҳисоб-китоб натижалари ва бекарорлик соҳаларини солиштириш натижаларидан, азимутал тўлқин сони m нинг, ҳамда майда масштабlilik даражасининг ортиб бориши билан, мос равишда, $m;N=14;20$ модасидан бошқа ҳолларда бекарорлик соҳасини камайиб боришини кўриш мумкин. $(m;N)=(18;20)$ ҳолдан бошқа учта ҳолда унча катта бўлмаган баркарорлик соҳалари кузатилади. Айланиш параметрининг $\Omega \in [0.2-1.0]$ интервалида, ғалаёнланиш модалари $(12;20)$, $(14;20)$ ва $(16;20)$ нинг эгри чизиклари бир-бири билан бекарорлик инкрементларининг айрим қийматларида кесишиши кузатилди. Ғалаёнланиш модаси $(14;20)$, айланиш параметрининг $\Omega = 0.6$ қийматидан бошлаб энг катта инкремент қийматига эга.

Калит сўзлар: ночизикли ностационар модель, ўзгравитацияланувчи диск, гравитацион бекарорлик, майда масштабlilik модалар.

Поляризационные характеристики диффузно отраженного и проходящего излучения в среде с конечной оптической толщиной

М.М. Собиров, Ж.Ю. Розиков*, В.У. Рузибоев

Ферганский государственный университет, ул. Мураббийлар 19, 150100, Фергана, Узбекистан

Получена 09.04.2021

* Corresponding author: e-mail rozikovjurabek1991@gmail.com, Phone: +998905348910

Рассчитаны степени поляризации диффузно проходящего и диффузно отраженного назад излучения вследствие многократного рассеяния в слоях мутной среды с конечной оптической толщиной, когда среда возбуждалась неполяризованным монохроматическим излучением. Исследованы образования, исчезновения и изменения положения нейтральных точек в угловых поляризационных характеристиках вторичного излучения в зависимости от угла освещения, оптических параметров и геометрической толщины среды. Расчёты проведены в рамках теории S и T матриц Chandrasekara, развитой по новой методике расчёта уравнения переноса поляризованного излучения в средах с конечными толщинами.

Ключевые слова: поляризованное излучение, оптическая толщина, S и T матрицы, нейтральные точки, степень поляризации.

The degrees of polarization of diffusively transmitted and diffusively reflected backward radiation due to multiple scattering in layers of turbid medium with a finite optical thickness when the medium was excited by unpolarized monochromatic radiation were calculated. The formation, disappearance, and changes in the position of neutral points in the angular polarization characteristics of secondary radiation as a function of the illumination angle, optical parameters, and geometric thickness of the medium were investigated. Calculations have been carried out within the framework of the Chandrasekar theory and S and T matrices, developed by a new method of calculating the polarized radiation transfer equation in media with finite thicknesses.

Keywords: polarized radiation, optical thickness, S- and T- matrices, neutral points, degree of polarization.

<https://doi.org/10.52304/v23i2.234>

I. Введение

Как известно, для наблюдения за состоянием атмосферы и поверхностью Земли, широко используются зондирующие устройства, установленные в летательные аппараты и спутники Земли. Со временем совершенствуются методы зондирования, способы передачи и регистрации световых сигналов и обработки полученных данных.

Использование в качестве сигналов поляризованного излучения приводит к существенному расширению возможности получения информации о состоянии атмосферы, увеличивается число параметров, характеризующих физическое состояние атмосферы, повышается точность измерений т.д. [1, 2]. По этой причине, наблюдается постоянный интерес к этой теме, и всё время она находится в поле зрения специалистов [3-5].

Одно из явлений, наблюдаемых в процессе переноса поляризационного излучения в слоях атмосферы, – это образование нейтральных точек поляризации Бабинне, Брюстера и Араго (Bab , Bg , Ar). Естественные неполяризованные солнечные лучи при переходе через слои атмосферы, в результате рассеяния на воздушных аэрозольных частицах и на флуктуациях плотности, поляризуются. При определённых значениях углов освещения и наблюдения степень поляризации прошедшего через слои атмосферы излучения равна нулю, образуются точки с нулевой поляризацией. Аналогичные нейтральные точки наблюдаются и сверху, когда солнечные лучи отражаются атмосферой назад. Эти точки называются анти-Бабинне, анти-Брюстер и анти-Араго (Bab^R , Bg^R , Ar^R). Они наблюдаются из высотных самолётов, воздушных шаров и спутников. Характеристики этих точек описаны давно в классических работах Чандрасекара, Коульсона [6, 7] и позже в работах других авторов [8]. Несмотря на это, с появлением новых обстоятельств к этой теме периодически возвращаются [9–11].

Известно, что при зондировании поверхности Земли с нейтральных точек, полученные фотографии имеют более высокое качество, чем из ненулевых точек [1, 2]. По этой причине для наведения оптических приборов следует заранее знать точное место положения нейтральных точек на плоскости солнечной вертикали. Положения нейтральных точек зависят как от места положения солнца относительно зенита и угла наблюдения, так и от значений оптических параметров слоя атмосферы и высоты наблюдения.

Несмотря на то, что эти и другие вопросы имеют определённые теоретические обоснования и имеются методы исследования, в последнее время поднимается вопрос о повышении степени точности этих расчётов [12].

Впервые Чандрасекаром был разработан метод решения уравнения переноса для исследования поляризационных характеристик излучения, распространяющегося в атмосфере, основанный на принципах инвариантности Амбарцумяна [6]. Метод расчёта Чандрасекара, основанный на методе S -матрицы, в той или иной форме до сих пор является основным методом расчёта при изучении поляризационных явлений в физике атмосферы.

Позднее в работах Ж. Ленобле и Е. Ивченко, Г. Пикуса, Н. Юлдашева [13, 14] метод решения уравнения переноса поляризованного излучения

Чандрасекара был обобщен с учётом факторизованного вида S -матрицы относительно полярных углов падающего и рассеянного излучений, являющихся следствием принципа взаимности. В частности, теория была обобщена для исследования поляризационной люминесценции кристаллов при возбуждении его резонансным излучением, с учетом спектральных характеристик поляризованного излучения и влияния, многократного зеркального отражения излучения от внутренней границы кристалла. Построенная теория эффективно применялась для изучения поляризационных характеристик резонансного излучения в кубических кристаллах и анализа экспериментальных спектров экситон-поляритонной люминесценции в одноосных кристаллах [15–17].

Однако, эти расчёты были проведены в модели полубесконечной среды. Для изучения атмосферных поляризационных явлений в работе [18], эта теория обобщена для сред с конечными оптическими толщинами. В [19] было рассмотрено влияние кратности рассеяния на образование и характеристики нейтральных точек, а в [20, 21] исследовано поведение нейтральных точек в модели полубесконечной среды. Эти расчёты были проведены с целью проверки правильности наших данных с решениями других авторов. Сопоставления результатов численных расчётов, выполненных по нашей теории при тех же значениях параметров, с расчётными данными других авторов, в пределах точности совпадают.

Настоящая статья посвящена исследованию угловых характеристик нейтральных точек в рамках теории, развитой в [18]. Как было упомянуто выше, характеристики нейтральных точек достаточно хорошо описаны в классических работах [6–8]. Но в этих работах в описании, касающемся характеристик точки Араго, есть некоторые моменты, которые требуют уточнения, это отражено в монографиях по оптике атмосферы (н-р, [1, 2, 22]). По этой причине, основное внимание нами уделено определению характеристик точки Араго.

II. Постановка задачи. Основные уравнения

Пусть на слои атмосферы падает плоская монохроматическая световая волна с полным потоком πF и распространяется в направлении $\Omega_0(\theta_0, \varphi_0)$. В этом случае уравнение для интенсивности $I(\tau, \Omega)$ в виде столбца матрицы Стокса

$I(I, I_r, U, V)$ рассеянного излучения на геометрической глубине $(-z)$ можно представить в виде [6]:

$$\mu \frac{dI(\tau, \Omega)}{d\tau} = I(\tau, \Omega) - \frac{\tilde{\omega}_0}{4\pi} \int_0^1 d\mu' \int_0^{2\pi} d\varphi' P(\Omega, \Omega') I(\tau, \Omega') - \frac{\tilde{\omega}_0}{4} \exp(-\tau/\mu_0) P(\Omega, \Omega_0) F \quad (1)$$

Здесь ось z направлена перпендикулярно вверх от плоскости падения первичного потока, $\mu = \cos\theta$, θ, φ – полярные и азимутальные углы, $\tau = (\alpha_{\text{ист}} + \sigma)z$ – оптическая толщина среды, $\alpha_{\text{ист}}$ – истинное поглощение, $\tilde{\omega}_0$ – альbedo, квантовый выход однократного рассеяния, $P(\Omega, \Omega')$ – матрица однократного рэлеевского рассеяния размером (4×4) , падающий поток также представляется в виде столбца матрицы Стокса $F(F_I, F_r, F_U, F_V)$.

Исходя из поставленной задачи, для определения решения уравнения (1) необходимо выполнение следующих граничных условий,

$$I(\tau = 0, -\mu, \varphi) = 0, \quad (0 < \mu \leq 1), \quad (2)$$

$$I(\tau = \tau_1, +\mu, \varphi) = 0, \quad (0 < \mu \leq 1). \quad (3)$$

Интенсивности диффузно отраженного и прошедшего через среду излучений определяются через $S(\tau_1, \Omega, \Omega_0)$ и $T(\tau_1, \Omega, \Omega_0)$ матрицы, которые связаны с падающим потоком

$$I^{\text{инт}}(\tau = 0, \Omega) = (\tilde{\omega}_0 / 4\mu) S(\tau_1, \Omega, \Omega_0) F(\tau = 0, \bar{\Omega}_0), \quad (4)$$

$$I^{\text{про}}(\tau = \tau_1, \bar{\Omega}) = (\tilde{\omega}_0 / 4\mu) T(\tau_1, \Omega, \Omega_0) F(\tau = 0, \bar{\Omega}_0). \quad (5)$$

Если учесть, что S и T матрицы удовлетворяют принципу взаимности:

$$\tilde{S}(\tau_1; \mu, \varphi; \mu_0, \varphi_0) = S(\tau_1; \mu_0, \varphi_0; \mu, \varphi),$$

$$\tilde{T}(\tau_1; \mu, \varphi; \mu_0, \varphi_0) = T(\tau_1; \mu_0, \varphi_0; \mu, \varphi),$$

тогда метод расчёта, предложенный в [13, 14], можно обобщить и для вычисления $S(\tau_1, \Omega, \Omega_0)$ и $T(\tau_1, \Omega, \Omega_0)$ матриц.

Эти матрицы представляются в виде суммы трёх независимых слагаемых:

$$S(\tau_1, \Omega, \Omega_0) = Q\{(3/4)S^{(0)}(\tau_1, \mu, \mu_0) + [(1-\mu^2)(1-\mu_0^2)]^{1/2} S^{(1)}(\tau_1, \Omega, \Omega_0) P^{(1)}(\mu, \varphi, -\mu_0, \varphi_0) + S^{(2)}(\tau_1, \Omega, \Omega_0) P^{(2)}(\mu, \varphi, -\mu_0, \varphi_0)\}, \quad (6)$$

$$T(\tau_1, \Omega, \Omega_0) = Q\{(3/4)T^{(0)}(\tau_1, \mu, \mu_0) + [(1-\mu^2)(1-\mu_0^2)]^{1/2} T^{(1)}(\tau_1, \Omega, \Omega_0) P^{(1)}(\mu, \varphi, -\mu_0, \varphi_0) + T^{(2)}(\tau_1, \Omega, \Omega_0) P^{(2)}(\mu, \varphi, -\mu_0, \varphi_0)\}. \quad (7)$$

Значения этих матриц определяются шестнадцатью $X(\mu), Y(\mu)$ функциями. Восемь из них (по четыре) определяют $S_0^{(0)}, T_0^{(0)}$ матрицы и образуют две системы матричных уравнений с размерностью (4×4) , а остальные восемь взаимно несвязанных скалярных уравнений определяют $S^{(1)}, T^{(1)}$ матрицы и $S^{(2)}, T^{(2)}$ функции [18].

II.1. Связь между альbedo и оптической толщиной

Полученные интегральные уравнения зависят от двух параметров; $\tilde{\omega}_0$, альbedo, квантовый выход однократного рассеяния и τ , оптической толщины среды. Эти две величины взаимно связаны и определяются через оптические параметры среды и геометрической толщины: $\tilde{\omega}_0 = \sigma / (\alpha_{\text{ист}} + \sigma)$ и $\tau = (\alpha_{\text{ист}} + \sigma)z$, где $\alpha_{\text{ист}}$ – истинное поглощение, σ – коэффициент рассеяния, z – геометрическая толщина среды.

Между тремя параметрами можно установить следующую связь. Если среда абсолютно диссипативная, рассеяние в среде отсутствует $\sigma = 0$. В этом случае при $\mu = 1$, уравнение переноса (1) переходит в закон Ламперта-Бугера,

$$I = I_0 \exp(-\tau), \quad (8)$$

где $\tau = \alpha_{\text{ист}} z$ – оптическая толщина среды без рассеивающих центров. При учёте рассеяния между альbedo и оптической толщиной имеется следующая связь

$$\tau = \frac{1}{1 - \tilde{\omega}_0} \tau_0, \quad (9)$$

где $\tau_0 = \alpha_{\text{ист}} z$ – оптическая толщина среды без центров рассеяния. В случае консервативной среды, когда $\tilde{\omega}_0 = 1$ формулу (9) можно переписать в следующем виде

$$\tau = \tau_0 / \tilde{\omega}_0 = \tau_0. \quad (10)$$

В отличие от диссипативной среды, в этом случае оптическая толщина среды определяется только коэффициентом рассеяния среды $\tau_0 = \sigma z$.

Изменение значения оптической толщины связано с изменением геометрической ширины среды.

В формуле (9) можно сделать следующую перестановку $\tau_0 = \alpha_{\text{ист}}^0 z_0 = z_0 / l_0$, где $l_0 = 1 / \alpha_{\text{ист}}^0$ – характерная длина. С учётом этого (9) перепишем в следующем виде:

$$\tau = \frac{\tau_0}{1 - \tilde{\omega}_0} \frac{z}{z_0}. \quad (11)$$

Для начала точки отсчёта оптической толщины выберем значение $\tau = \tau_0$, соответствующее случаю $\tilde{\omega}_0 = 0$. В этом случае величина z/z_0 показывает относительное изменение геометрической толщины среды. Здесь следует обратить внимание на следующие два момента.

1. Если оптические параметры среды постоянные, $\sigma = \text{const}$, $\alpha_{\text{ист}} = \text{const}$, тогда $\tilde{\omega}_0 = \text{const}$. В этом случае оптическая толщина τ изменяется в зависимости от геометрической толщины среды z/z_0 , и это равносильно добавлению или отнятию нового слоя к среде.

2. Если $z = \text{const}$, тогда изменение оптической толщины среды связано только соотношением между оптическими параметрами $\alpha_{\text{ист}}$ и σ , которое определяет значение $\tilde{\omega}_0$.

III. Результаты численных расчётов

Интенсивности прошедшего и отраженного атмосферой солнечного излучения определяются по формулам (4) и (5). Падающее неполяризованное излучение имеет следующие параметры Стокса

$$F_I = F_r = (1/2)F, F_U = F_V = 0. \quad (12)$$

Степень поляризации, как прошедшего, так и отраженного назад излучения рассчитана по формуле

$$P_{\text{зм}} = (I_i - I_r) / (I_i + I_r). \quad (13)$$

Угловые характеристики рассчитаны по всей меридиональной плоскости солнечной вертикали, когда $\psi = \varphi_0 - \varphi = 0, \pi$.

Решения системы нелинейных интегральных уравнений для $X(\mu)$, $Y(\mu)$ функций, проводили методом итераций, численно. В отличие от других работ, интегрирование по пространству проводили не по переменной $\mu = \cos\theta$, а по θ в интервале

$[0^\circ, 90^\circ]$ в девяносто одной точке. Такое изменение переменной позволяет более точно учесть пространственное распределение интенсивности рассеянного излучения.

Ниже приведены результаты расчёта угловых характеристик поляризаций прошедшего и рассеянного назад излучения для трёх наборов значений альбедо и оптической толщины:

а) при $\sigma = \alpha_{\text{ист}}/2$, исходя из формулы (11), имеем $\tilde{\omega}_0 = 1/3$ и $\tau = (3/2)\tau_0(z/z_0)$;

б) при $\alpha_{\text{ист}} = \sigma$ имеем $\tilde{\omega}_0 = 0.5$ и $\tau = 2\tau_0(z/z_0)$;

с) при $\sigma = 2\alpha_{\text{ист}}$ имеем $\tilde{\omega}_0 = 2/3$ и $\tau = 3\tau_0(z/z_0)$.

В первом случае при однократном рассеянии поглощенное излучение в два раза больше, чем рассеянное излучение. Во втором случае они одинаковые, в третьем случае рассеянное излучение в два раза больше поглощенного.

Расчёты проведены при постоянном $\tilde{\omega}_0$ для двух значений τ_0 : $\tau_0 = 0.1$ и $\tau_0 = 0.5$. Пятикратное увеличение оптической толщины возможно, когда $z = z_0$ и $z = 5z_0$, или $\alpha_{\text{ист}} = \alpha_{\text{ист}}^0$ и $\alpha_{\text{ист}} = 5\alpha_{\text{ист}}^0$. Это соответствует случаю, когда либо геометрическая толщина слоя, либо коэффициент поглощения излучения увеличивается в пять раз.

На рис. 1, 2 приведены результаты расчёта угловой зависимости степени поляризации прошедшего и отраженного излучений для случая а) ($\sigma = \alpha_{\text{ист}}/2$ и $\tilde{\omega}_0 = 1/3$) при трёх значениях угла возбуждения.

Из графиков видно, что при больших значениях μ_0 на угловых характеристиках прошедшего и отраженного назад излучений наблюдаются только точки Бабиня (Bab , Bab^R) и Брюстера (Bg , Bg^R). С приближением источника освещения к горизонту ($\theta_0 \approx 84^\circ$) точки Брюстера исчезают, но в другой полуплоскости появляются точки Араго (Ag , Ag^R). Такое поведение точек Араго характерно как для прошедшего, так и для отраженного назад излучения. Однако, с увеличением оптической толщины до $\tau = 0.75$ в характеристиках прошедшего излучения точка Араго исчезает (рис. 2, кривая 1'), в характеристиках отраженного излучения качественных изменений не наблюдается.

Как было указано выше, с ростом оптической толщины увеличивается вероятность рассеяния излучения, отсюда следует, что точки Араго образуются при небольших числах рассеяния, нежели точки Бабиня и Брюстера.

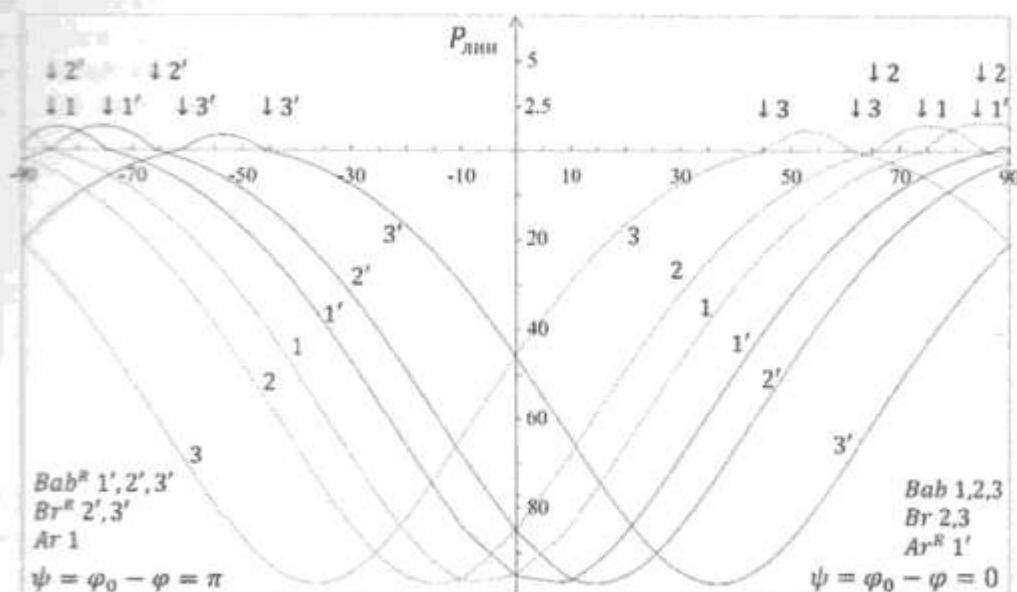


Рисунок 1. Смещения положения нейтральных точек по солнечной вертикали в зависимости от угла освещения. Солнце находится в полуплоскости $\psi=0$ (также и на остальных рисунках). Оптические параметры среды: $\tilde{\omega}_0=1/3$, $\tau_0=0.15$; углы освещения: $\mu_0=0.1$ (кривые 1, 1'), $\mu_0=0.25$ (2, 2'), $\mu_0=0.6$ (3, 3'). Пунктирные кривые 1, 2, 3 – отраженные излучения, жирные кривые (1', 2', 3') – прошедшие излучения. По оси абсцисс отложены полярные углы наблюдения в градусах. В положительной части поляризации масштаб увеличен в 4 раза. Стрелками указаны положения нейтральных точек.

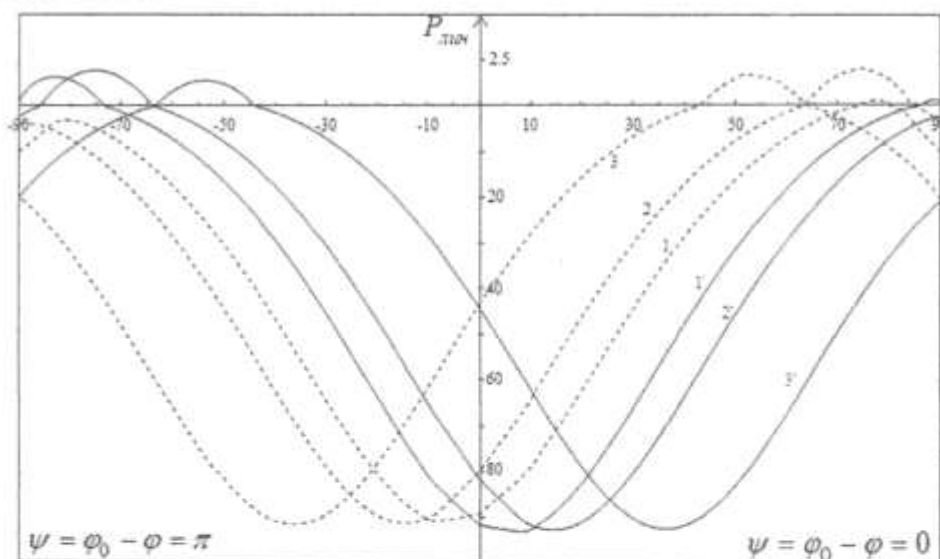


Рисунок 2. Исчезновение точки Араго в поляризационных характеристиках с увеличением оптической толщины среды. Здесь $\tilde{\omega}_0=1/3$, $\tau_0=0.75$; углы освещения те же, что и на рис. 1.

На рис. 3 показано изменение углового расстояния между точками Бабиня и Брюстера в характеристиках прошедшего излучения в зависимости от угла освещения для случая б).

Оптические параметры среды: $\alpha_{ист} = \sigma$, $\tilde{\omega}_0 = 0.5$, значения оптической толщины $\tau = 0.2$ и $\tau = 1$. Из графиков видно, что с ростом углового расстояния источника относительно горизонта, угловое

расстояние между точками сначала увеличивается, но с приближением к зениту уменьшается, а в зените они сливаются в одной точке и исчезают. Такое поведение характерно и для отраженного

излучения. При малых значениях оптической толщины, когда $\tau = 0.2$ ($\tau_0 = 0.1$), в характеристиках отраженного излучения точка Араго сохраняется только при больших значениях θ_0 и θ (кр. 1).

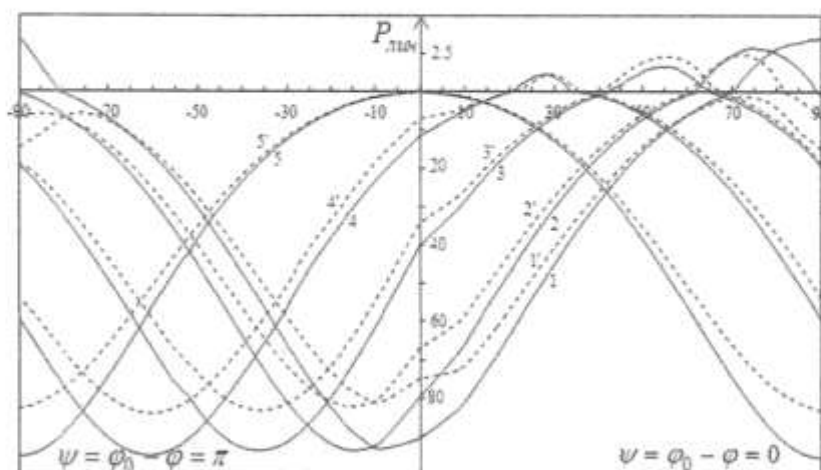


Рисунок 3. Изменение углового расстояния между точками Бабиня и Брюстера в поляризационных характеристиках отраженного излучения в зависимости от угла освещения. Здесь $\bar{\omega}_0 = 0.5$, Кривые 1-5 рассчитаны при $\tau = 0.2$, кр. 1'-5' при $\tau = 1$. Кривым 1,1'; 2,2'; 3,3'; 4,4'; 5,5' соответствуют углы освещения $\mu_0 = 0.1, 0.25, 0.6, 0.88, 1$.

Графики на рис. 4 и 5 рассчитаны при значениях $\sigma = 2\alpha_{\text{ист}}$, $\bar{\omega}_0 = 2/3$, $\tau = 0.3$ и $\tau = 0.15$, когда величина рассеяния больше поглощения. В отличие от предыдущих случаев, точка Араго наблюдается при больших значениях углов освещения (рис. 4, $\theta_0 \approx 76^\circ$, кривая 2), также увеличивается угловое расстояние между точками Бабиня и Брюстера. С

ростом значения оптической толщины, удовлетворяющего условию $\tau \geq 2.9$ ($\tau_0 = 0.5$), в характеристиках прошедшего излучения нейтральные точки исчезают (рис. 5, кривые 4, 4'), а в характеристиках отраженного назад излучения точки Бабиня и Брюстера сохраняются.

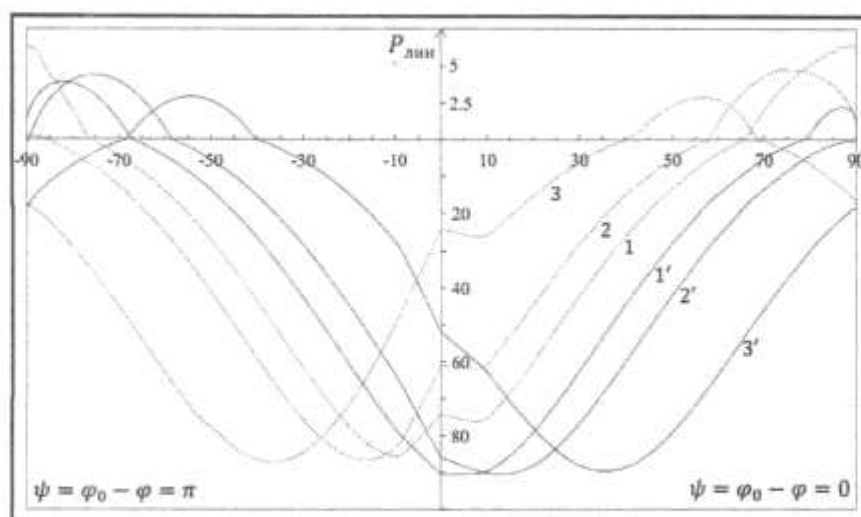


Рисунок 4. Изменения положения нейтральных точек с увеличением значения альбеда. Здесь $\bar{\omega}_0 = 2/3$, $\tau = 0.3$, углы освещения те же, что и на рис. 1.

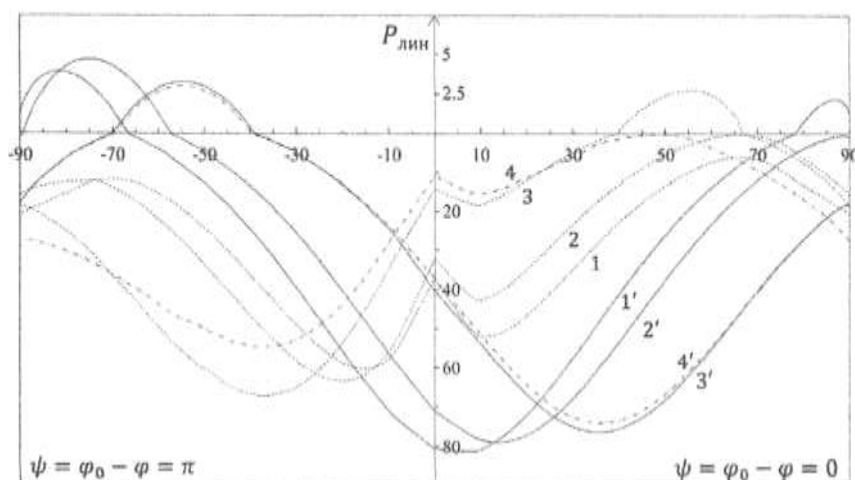


Рисунок 5. Исчезновение нейтральных точек излучения с увеличением оптической толщины среды. Кривые 1,1'; 2,2'; 3,3' рассчитаны при $\tilde{\omega}_0 = 2/3$, $\tau = 1.5$, углы освещения те же, что и на рис. 4. Кривым 4,4' соответствуют следующие параметры: $\tilde{\omega}_0 = 0.9$, $\tau = 4.5$, $\mu_0 = 0.6$ (отраженное излучение – кривая 4, прошедшее – 4').

С дальнейшим увеличением значений τ угловое расстояние между ними остаётся постоянным, и это соответствует результатам Каттавара [8], изменяется только с изменением значения $\tilde{\omega}_0$. Н-р, при $\theta_0 \approx 53^\circ$ с изменением значений альбедо от $\tilde{\omega}_0 = 2/3$ ($\tau = 0.15$) до $\tilde{\omega}_0 = 0.9$ ($\sigma = 9\alpha_{\text{нст}}, \tau = 4.5$) угловое расстояние увеличивается от $\Delta\theta \approx 30^\circ$ до $\Delta\theta \approx 40^\circ$.

При $\tau \rightarrow \infty$ среда переходит на модели полубесконечной среды [20, 21]. В этом случае интенсивность и поляризация отраженного назад излучения не зависят от оптической толщины и остаётся только параметр альбедо. Несмотря на такое упрощение, все особенности нейтральных точек в характеристиках отраженного назад излучения сохраняются. Угловые характеристики качественно имеют такой же вид, что и в случае среды с конечной толщиной для отраженного излучения (рис. 5).

В прикладных применениях приведенных расчётов основное значение имеет определение положений точек Бабинне и Брюстера в зависимости от углового положения солнца относительно зенита [1, 2]. В табл. 1 приведены результаты такого расчёта при значениях оптических параметров, что и на рис. 3. Отметим, что результаты наших расчётов заметно отличаются от результатов расчёта, приведенного в [7], в области освещения $\theta_0 \approx 76^\circ$, где наблюдается точка Араго. Для краткости в таблице приведены значения только наи-

более характерных точек освещения из 91 точек деления для θ в интервале $[0^\circ, 90^\circ]$. Из таблицы видно, что на всех углах наблюдения по солнечной вертикали, и сверху и снизу атмосферы, фиксируется шесть точек. Однако, из произвольной точки наблюдения всегда видны только четыре точки: при этом точки Бабинне (Bab , Bab^R) останутся такими, как были, а точки Брюстера (Bg , Bg^R) и Араго (Ar , Ar^R) меняются местами в зависимости от угла освещения.

В поляризационных характеристиках как прошедшего, так и отраженного излучения максимальные значения поляризации наблюдаются при условии $\mu_0^2 = 1 - \mu^2$, когда падающие и наблюдаемые лучи взаимно перпендикулярны. Из рис. 1-5 видно, что с ростом альбедо значение максимальной поляризации падает. В случае, когда $\tilde{\omega}_0 = 1/3$ и $\tau = 0.15$, $\tau = 0.75$, максимумы поляризации почти не зависят от угла освещения и составляют в среднем 94–96%. С ростом значений альбедо, $\tilde{\omega}_0 = 2/3$ и $\tau = 0.3$, $\tau = 1.5$, этот показатель падает, и в среднем для прошедшего излучения составляет 60–67%, а для отраженного составляет 75–80%. При $\tilde{\omega}_0 = 0.9$ и $\tau = 4.5$ поляризация прошедшего излучения уменьшается до 53%, а отраженного назад на 73%.

Отметим, что в положительной части характеристик, приведенных на рис. 1-5, как для прошедшего, так и для отраженного излучения мак-

симум поляризации между точками Бабине и Брюстера наблюдается в точке $\theta \approx \theta_0$. Это есть точка, где находится источник освещения.

Результаты наших расчётов, приведенных на рис. 3, при значениях оптических параметров и $\theta_0 \approx 53^\circ$ совпадают с результатами расчётов Секары для прошедшего излучения и Коульсона для отраженного излучения [7]. Такие же совпадения наблюдаются и в результатах расчётов, представленных на рис. 1, в случае $\tau = 0.2$. Однако, при $\tau = 1$ имеются расхождения по максимуму поляризации и по угловому расстоянию между точками Бабине и Брюстера на $20\text{--}25^\circ$, а положения точек Араго в работах Секары и Коульсона не определены.

Падение поляризации с увеличением значения альбеда и оптической толщины связано с ростом вероятности рассеяний за счёт увеличения оптической толщины. Следует обратить внимание на то, что деполяризация в точке максимума поляризации в прошедшем излучении выше, чем в отраженном. Это связано с тем, что прошедшее излучение средне статически претерпевает большее количество рассеяний, чем отраженное. Поток, формирующий отраженное излучение, не обязательно проходит всю оптическую толщину, так как часть потока формируется из одно-, двукратного и т.д. рассеянного излучения.

Таблица 1. Зависимости углового расстояния нейтральных точек от положения солнца относительно зенита (в град $\bar{\omega}_0 = 0.5$).

μ_0	0	0,01	0,02	0,04	0,06	0,11	0,14	0,15	0,17	0,18	0,21	0,23	0,26	0,32	0,43	0,54	0,65	0,76	0,87	0,93	0,94	0,95	0,96	0,97	0,98	1	
θ_0 , град	90	89,4	88,7	87,4	86,2	83,6	81,7	81,0	80	79,1	77,8	76,5	74,5	71,2	64,3	57,0	49,0	39,9	28,6	21,0	19,1	17,1	14,8	12,1	8,5	0	
Отраженное излучение, $\tau=0.2$																											
Bab	77,1	75,8	75,2	73,9	72,5	71,2	69,8	68,5	67,8	68,7	64,3	63,6	61,4	58,5	52,3	46,4	38,9	31,1	22,7	14,8	13,5	12,1	10,3	8,5	3,8	0	
Br	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	90	88,1	84,9	77,1	69,2	59,2	48,2	29,9	21,0	19,1	17,1	14,8	12,1	8,5	0	-	
Ar	77	77,1	77,1	78,5	79,8	80,4	82,3	84,9	84,9	86,2	88,1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Отраженное излучение, $\tau=1$																											
Bab ^R	-	-	-	-	-	-	70,5	68,5	66,4	65,7	64,3	62,2	60,0	57,0	49,9	43,7	36,8	28,6	21,1	14,8	12,9	70,5	68,5	12,1	-	0	
Br ^R	-	-	-	-	-	-	75,2	77,1	79,1	79,8	80,4	81,0	82,3	81,7	77,8	71,2	62,2	51,5	28,6	21,0	19,1	17,1	14,8	12,1	8,5	0	
Ar ^R	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Прошедшее излучение, $\tau=0.2$																											
Bab ^R	80,4	78,	77,1	75,2	73,2	1,9	70,5	69,2	67,8	66,4	65,0	63,6	62,2	59,2	52,1	47,3	39,9	33,5	24,3	17,1	15,0	14,8	13,0	12,1	8,5	0	
Br ^R	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	90	89	88,1	86,8	84,3	76,5	68,2	59,2	48,2	33,5	25,8	23,5	20,1	17,1	14,8	12,1	0
Ar ^R	79,8	79,8	79,8	80,4	81,0	82,3	83,6	84,3	86,2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	
Прошедшее излучение, $\tau=1$																											
Bab ^R	-	78,5	76,5	74,5	72,5	69,2	67,1	66,3	65,0	64,3	63,6	61,9	60,0	57,0	49,9	44,6	37,9	31,1	22,7	17,1	14,8	13,5	12,1	8,5	0	-	
Br ^R	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	89,4	88,7	88,1	87,4	85,5	78,0	71,2	62,2	51,5	36,8	27,2	24,3	22,7	19,1	14,8	8,5	0
Ar ^R	-	79,8	79,8	79,8	80,4	82,3	84,3	85,5	90	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	

Развитая теория позволяет рассчитать интенсивность и поляризацию рассеянного солнечного излучения по всем азимутальным и полярным точкам полусферы атмосферы над горизонтом. Если зондирование проводить поляризованным излучением, тогда поляризационные характеристики вторичного излучения качественно отличаются от характеристик неполяризованного естественного солнечного излучения. В приведенных выше расчётах считалось, что излучение монохроматическое. Построенную теорию можно обобщить и для анализа поляризационных харак-

теристик белого солнечного света по частотному спектру.

В конце статьи следует заметить, что расчёты проводили только при значениях альбеда $\bar{\omega}_0 \leq 2/3$, когда в среде имеется заметное поглощение и это соответствует реальному состоянию атмосферы. При значениях $\bar{\omega}_0 \geq 2/3$ точности расчета значений функций $X(\mu)$, $Y(\mu)$ уменьшаются. Консервативный случай требует отдельного рассмотрения. Такая же проблема возникает и в случае решения задачи по методу расчёта Чандрасекара.

IV. Заключение

Исследованы угловые поляризационные характеристики диффузно прошедшего и диффузно отраженного назад, многократно рассеянного естественного неполяризованного солнечного излучения в слоях атмосферы. Расчёты проведены в рамках теории Н-функций для полубесконечных сред и обобщены для сред с конечными толщинами.

Определены границы появления и исчезновения нейтральных точек в зависимости от оптических параметров среды. Показано, что при малых значениях альбедо $\tilde{\omega}_0 \leq 1/3$ появляется точка Араго при малых значениях углов освещения и наблюдения, когда Солнце находится вблизи горизонта ($\theta \approx \theta_0 \approx 84^\circ$), и слабо зависит от оптической толщины.

С увеличением значения $\tilde{\omega}_0$ точка Араго появляется при больших значениях наблюдения и освещения ($\theta \approx \theta_0 \approx 76^\circ$) и сильно зависит от значения τ . Также увеличивается угловое расстояние между точками Бабиня и Брюстера.

Увеличение вклада рассеянного излучения приводит к исчезновению точки Араго. В области $\sigma \geq 2\alpha_{\text{уст}}$, $\tilde{\omega}_0 \geq 2/3$ и $\tau \geq 2.9$ в характеристиках прошедшего излучения, независимо от угла освещения, все нейтральные точки исчезают. Однако, в характеристиках отраженного назад излучения точки Бабиня и Брюстера остаются.

Определено, что в модели полубесконечной среды, когда $\tau \rightarrow \infty$ угловые поляризационные характеристики имеют качественно аналогичный вид, как в случае отраженного излучения в средах с конечной толщиной. Этот результат показывает, что для образования нейтральных точек достаточно учесть вклад рассеянного излучения в приповерхностном слое полубесконечной среды.

Метаданные

The polarization characteristics of diffusively transmitted and diffusively reflected radiation in medium with a finite optical thickness

M.M. Sobirov, J.Yu. Rozikov and V.U. Ruziboev

Fergana State University, Murabbiylar str., 19, 150100, Fergana, Uzbekistan

The degrees of polarization of diffusively transmitted and diffusively reflected backward radiation due to multiple scattering in layers of turbid medium with a finite optical

thickness when the medium was excited by unpolarized monochromatic radiation were calculated. The formation, disappearance, and changes in the position of neutral points in the angular polarization characteristics of secondary radiation as a function of the illumination angle, optical parameters, and geometric thickness of the medium were investigated. Calculations have been carried out within the framework of the Chandrasekar theory and S and T matrices, developed by a new method of calculating the polarized radiation transfer equation in media with finite thicknesses.

Keywords: polarized radiation, optical thickness, S and T matrices, neutral points, degree of polarization.

Литература (References)

- [1] Lei Yan, Taxia Wu, Xuegi Wang. Polarization remote sensing for land observation. 2017. DOI: [10.5772/intechopen.79937](https://doi.org/10.5772/intechopen.79937).
- [2] Lei Yan, Bin Yang, Feizhou Zhang, Yun Xiang, Wei Chen. Polarization remote sensing physics. Peking University Press and Springer Nature Singapore Pte Ltd. 2020. <https://doi.org/10.1007/978-981-15-2886-6>.
- [3] T.A. Sushkevich. On the achievement of the theory of radiation transfer. Modeling of radiation transfer in natural media. Proceedings of the Fifteenth Open All-Russian Conference "Modern problems of Earth remote sensing from space" (Moscow, Institute of Space Research RAS, 2008).
- [4] D. Miyazaki, M. Ammar, R. Kawakami, K. Ikeuchi. Estimating sunlight polarization using a fisheye lens. Information and Media Technologies 5(1), 164-176 (2010). DOI: [10.11185/imt.5.164](https://doi.org/10.11185/imt.5.164).
- [5] X. Fan, P. Goloub, J.L. Deuze, H. Chen, D. Zhang, D. Tange, et al. Evaluation of PARASOL aerosol retrieval over North East Asia. Remote Sensing of Environment 112(3), 697-707 (2008). DOI: [10.1016/j.rse.2007.06.010](https://doi.org/10.1016/j.rse.2007.06.010).
- [6] S. Chandrasekar. Radiant Energy Transfer (Moscow, Foreign Literature, 1953).
- [7] K.L. Coulson. Polarization and intensity of light in the atmosphere. A. Deepak Publishing, Virginia, USA (1988).
- [8] G.W. Kattawar, G.N. Plass, S.J. Hitzfelber. Multiple scattered radiation emerging from Rayleigh and continental haze layers. 1: Radianse, polarization, and neutral points. Applied Optics 15(3), 632-647 (1976). DOI: [10.1364/AO.15.000632](https://doi.org/10.1364/AO.15.000632).
- [9] G. Horváth, B. Bernáth, B. Suhai, A. Barta, R. Wehner. First observation of the fourth neutral polarization point in the atmosphere. J. Optical Society of America A 19(10), 2085-2099 (2002).
- [10] G. Horváth, D. Varjú. Principal neutral points of atmospheric polarization. In: Polarized Light in Animal Vision (Springer, Berlin, Heidelberg, 2004). <https://doi.org/10.1007/978-3-662-09387-04>.
- [11] Neutral points in an atmosphere-ocean system 2: Downwelling light field. Applied Optics 50(3), 335-46 (2011). DOI: [10.1364/AO.50.000335](https://doi.org/10.1364/AO.50.000335).
- [12] Vijay Natraj, King-Fai Li, and Yuk L. Yung. Rayleigh scattering in planetary atmospheres: Corrected tables through

- accurate computation of X and Y functions. *The Astrophysical Journal* 609, 1909-1920 (2009).
- [13] J. Lenoble. Importance de la polarisation dans le rayonnement diffuse par une atmosphere planetair. *Journal of Quantativ Spektroskopy and Radiativ Transfer* 10, 533 (1970).
- [14] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus, and N.H. Yuldashev. Transfer of polarized radiation in crystals in the exciton region of the spectrum. Poyariton Effects. *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 80, 1228-1246 (1981).
- [15] M.M. Sobirov, and N.Kh. Yuldashev. Theory of polarized radiation transfer in cubic crystals in a longitudinal magnetic field in the region of exciton resonance. *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 87, 677-690 (1984).
- [16] E.L. Ivchenko, M.M. Sobirov. Peculiarity in the spectrum of two-phonon. Mandelstamm-Brillouin backward scattering. *Solid State Physics* 27, 1096-1104 (1985).
- [17] E.L. Ivchenko, M.M. Sobirov. Theory of two-phonon resonance light scattering involving acoustic and optical phonons. *Solid State Physics* 228, 2023-2031 (1986).
- [18] M.M. Sobirov, J.Y. Rozikov. Some questions of the theory of polarized radiation transfer in an isotropic medium with a finite optical thickness. *Scientific and Technical Journal, Fergana PI* 3, No.4, 15-24 (2020).
- [19] M.M. Sobirov, J.Y. Rozikov. Specific features in polarization of diffusely reflected and transmitted radiation in a medium with finite optical thickness. *Scientific and Technical Journal, Fergana PI*, 3, No.5, 155-159 (2020).
- [20] M.M. Sobirov, J.Y. Rozikov, V.U. Ruziboyev. Formation of neutral points in the polarization characteristics of secondary radiation in the semi-infinite medium model. *International Journal of Multidisciplinary Research and Analysis*. 04, No.041 (2021). DOI:10.47191/ijmra/v4-i4-07, p. 406-412.
- [21] M.M. Sobirov, J.Y. Rozikov, V.U. Ruziboyev. Uglovyye polarizatsionnye kharakteristiki diffuzno-otrazhenogo izlucheniya v polubeskonechnykh i sredakh s konechnoy opticheskoy tolshinoy. *Nauchno-tekhnicheskiiy zhurnal Ferganskogo politekhnicheskogo institute* 4, 4 (2021).
- [22] E. Mak-Kartni. *Optika atmosfery*, (Moskva, Mir, 1979).

Чекли оптик қалинликка эга бўлган муҳитлардан диффуз ўтган ва қайтган ўруғлик оқимини қутбланиш характеристикалари
М.М. Собиров, Ж.Ю. Розиков, В.У. Рузибоев

Фарғона давлат университети, Мураббийлар кўч., 19, 150100, Фарғона, Ўзбекистон

Чекли оптик қалинликка эга бўлган хира муҳитлардан монохроматик қутбланмаган нурланиш оқимини диффуз ўтиши ва қайтиши жараёнида, сочилиш туфайли қутбланиш даражаси қандай ўзгариши назарий ўрганилган. Муҳитдан ўтган ва қайтган иккиламчи нурланиш оқимининг қутбланиш даражасини ўзгариши муҳитнинг оптик қалинлиги, оптик параметрлари ва нурланишнинг тушиш ва қайтиш бурчакларига боғлиқлиги, шунингдек нейтрал нуқталарнинг бурчак характеристикалари таҳлил этилган. Хисоблашлар, Чандрасекар усулида

қутбланган нурланиш оқимини чекли қалинликдаги муҳитларда тарқалиш тенгламаларини ечиш усулини умумлаштириш натижасида орқали олинган, тенгламалар асосида бажарилган.

Калит сўзлар: қутбланиш характеристикалари оптик қалинлик, S ва T матрицалар, нейтрал нуқта, қутбланиш даражаси

Температурная зависимость химического потенциала и заселенности уровня Ландау двумерного электронного газа в постоянном магнитном поле

Б.Т. Абдулазизов*

Физико-технический институт АН РУз, ул. Ч. Айтматова 26, 100084, Ташкент, Узбекистан

Получена 11.08.2021

* Corresponding author: e-mail bt_abdulazizov@mail.ru, Phone: +998 91 186 06 05

Проведен численный расчет температурной зависимости химического потенциала при различных значениях фактора заполнения ν уровня Ландау. Найдена степень заполнения каждого уровня Ландау в зависимости от температуры. Приведена также низкотемпературная формула зависимости $\mu(T/T, \epsilon_F)$ на основе разложения Зоммерфельда. Обсуждается влияние теплового возбуждения, происходящего как внутри, так и между уровнями Ландау, на химический потенциал и заселенности уровней данной системы.

Ключевые слова: герероструктура, квантовая яма, двумерный электронный газ, заселенность уровня Ландау, магнитная осцилляция, химический потенциал, разложение Зоммерфельда, меж- и внутриуровневые возбуждения.

A numerical calculation of the temperature dependence of the chemical potential for various values of the filling factor ν of the Landau level is carried out. The degree of filling of each Landau level is found as a function of temperature. A low-temperature formula for the dependence of $\mu(T/T, \epsilon_F)$ based on the Sommerfeld expansion is also given. The influence of the intra- and interlevel thermal excitations on changes in the chemical potential with temperature is discussed.

Keywords: heterostructure, quantum well, two dimensional electron gas, Landau level population, magnetic oscillations, chemical potential, expansion of Sommerfeld, inter- and intralevel excitations.

<https://doi.org/10.52304/ujp.23i2.235>

I. Введение

При наличии магнитного поля, приложенного перпендикулярно плоскости квантовой ямы, спектр носителей становится полностью дискретным [1, 2]. С изменением магнитного поля меняется положение уровней Ландау, расстояния между ними, а также кратность вырождения уровней. Когда уровень Ферми пересекает уровень Ландау, ряд термодинамических величин резко изменяются. Это наблюдается в магнитных осцилляционных явлениях, н-р, осцилляции магнетосопротивления, восприимчивости,

химического потенциала, намагниченности, теплоемкости и т.д. [1-4]. Из наблюдаемых осцилляций можно определить важную информацию о зонных параметрах структуры, таких как эффективная масса, концентрация, спиновые расщепления и т.д.

До настоящего время проведено огромное количество теоретических расчетов, которые посвящены изучению термодинамических величин в зависимости величины магнитного поля B , температуры T , концентрации электронов в квантовой яме n_s , а также уширению уровня Γ , н-р [5-8].

В общем случае для таких расчетов требуются численные методы.

Ниже будем интересоваться изменением химического потенциала при фиксированном значении магнитного поля. Такая зависимость приведена в работе [7] для электронного газа в квантовой яме GaAs. Из этой зависимости следует, что последний заселенный уровень Ландау заполнен точно наполовину (н-р, для второго уровня фактор заполнения $\nu = 2.5$, для четвертого уровня $\nu = 4.5$), химический потенциал не меняется с температурой.

В случае $\nu > 2.5$ химический потенциал растет, а в случае $\nu < 2.5$ уменьшается нелинейно по T , пока $k_B T / \Gamma < 10$, здесь k_B – константа Больцмана. Но при дальнейшем росте температуры $k_B T / \Gamma > 10$, обе зависимости с $\nu \neq 2.5$ также постепенно становятся не зависящими от T . Таким образом, при температурах $k_B T / \Gamma > 10$ зависимость химического потенциала от температуры отсутствует и полагается $d\mu/dT = 0$.

Цель данной работы – изучить зависимости $\mu(T)$ при различных значениях фактора заполнения ν в широком интервале температур. Определить заполнение каждого уровня Ландау в зависимости от температуры. Обсудить влияние теплового возбуждения, происходящего как внутри, так и между уровнями Ландау, на изменение химического потенциала с температурой.

II. Модель

Для заданной температуры T , концентрации n_s , параметра уширения уровня Γ и магнитного поля B химический потенциал 2D-электронного газа $\mu(T, B, \Gamma)$ можно найти из следующих уравнений [5, 6, 8]

$$n_s = D\hbar\omega \sum_n \int_0^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\Gamma}} \exp\left[-\frac{(\epsilon - \epsilon_n)^2}{2\Gamma^2}\right] f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon. \quad (1)$$

Здесь

$$f(\epsilon, \mu, T) = \frac{1}{\exp[(\epsilon - \mu)/T] + 1} \quad (2)$$

функция распределения Ферми-Дирака, в которой для упрощения полагали $k_B = 1$, при этом $k_B T \rightarrow T$, ϵ_n – энергетические уровни Ландау (спиновое расщепление уровня не будем учитывать) и $\hbar\omega$ – циклотронная энергия.

$$\epsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega,$$

$$\hbar\omega = \hbar \frac{eB}{m^*} = \frac{1.16 \times 10^{-4}}{m^*/m_0} B \left[\frac{\text{eV}}{\text{T}} \right], \quad (3)$$

m^* – эффективная масса электрона. D – двумерная плотность состояния подзоны в отсутствие магнитного поля, которая связана с $\hbar\omega$ соотношением

$$D\hbar\omega = \frac{eB}{\pi\hbar}, \quad (4)$$

$$D = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} = \frac{m^*}{m_0} 413 \times 10^{12}, [\text{eV} \cdot \text{cm}^2]$$

Фактор заполнения ν определяется как $\nu = n_s / D\hbar\omega$.

Известно, что высокие температуры и/или большие значения параметра уширения $\Gamma \sim \hbar\omega$ сильно подавляют амплитуды осцилляции. Используемые ниже в расчетах значения уширения уровня Ландау ограничены условием $\Gamma \leq 0.1 \hbar\omega$. Это означает, что гауссианы соответствующих различных уровней заметно не перекрываются. Тщательные тестовые расчеты показывают, что в этих условиях уравнение (1) можно переписать в виде

$$n_s = D\hbar\omega \sum_n \int_{\epsilon_n - \hbar\omega/2}^{\epsilon_n + \hbar\omega/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\Gamma}} \exp\left[-\frac{(\epsilon - \epsilon_n)^2}{2\Gamma^2}\right] f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon \quad (5)$$

В такой форме записи, очевидно, что степень заполнения отдельно взятого уровня Ландау f_n с хорошей точностью равна

$$f_n = \int_{\epsilon_n - \hbar\omega/2}^{\epsilon_n + \hbar\omega/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\Gamma}} \exp\left[-\frac{(\epsilon - \epsilon_n)^2}{2\Gamma^2}\right] f(\epsilon, \mu, T) d\epsilon, \quad \nu = \sum_n f_n. \quad (6)$$

Ниже все расчеты проводятся на примере материала GaAs. Некоторые параметры расчетов указаны непосредственно на графиках.

III. Осцилляции $\mu(B)$ при разных температурах

Обсудим осцилляции $\mu(B)$ для трех значений температуры $T = 1, 10, 20$ К. Обычно экспериментальные температуры имеют значение порядка единиц Кельвина. Для того чтобы осцилляционные зависимости четко различались, здесь

использованы разные порядки значений температуры. Результаты расчетов этих зависимостей представлены на рис. 1. Из графика видно, что при значении магнитного поля, соответствующем полуполному фактору заполнения уровня ($\nu = 1.5, 2.5, 3.5$), химический потенциал не зависит от температуры. Справа от этих точек, где фактор заполнения меньше половинного заполнения, химический потенциал уменьшается с температурой. Слева, где фактор заполнения больше половинного заполнения, химический потенциал, наоборот, растет с температурой.

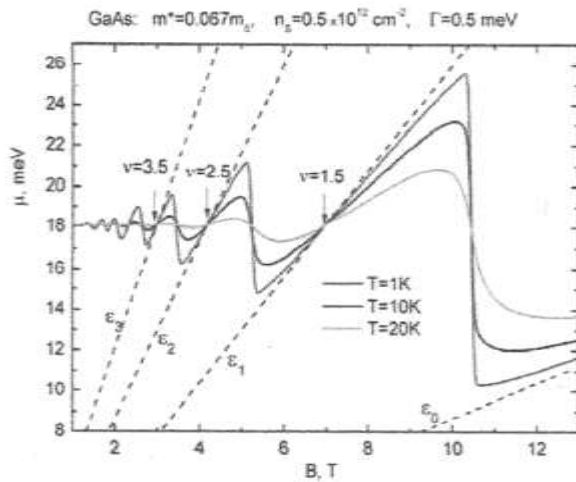


Рисунок 1. Осцилляции химического потенциала 2D-электронного газа в квантовой яме GaAs в зависимости от магнитного поля B при постоянном $\Gamma = 0.5$ meV для трех значений температуры $T = 1, 10, 20$ K. Стрелками указаны точки, соответствующие полуполному фактору заполнения. Штриховые прямые – уровни Ландау.

Таким образом, если величина магнитного поля фиксирована, то температурная зависимость химического потенциала 2D-электронного газа зависит от значений фактора заполнения ν .

IV. Температурная зависимость химического потенциала

Пусть энергия Ферми лежит внутри уровня Ландау с номером M : $\varepsilon_F \sim \varepsilon_M$. Предполагается, что температура достаточно низка $T \ll \Gamma < \hbar\omega$ и все нижние $M-1$ уровни полностью заполнены, и их концентрации не меняются с температурой, верхние уровни $n > M$ пусты. Нас интересует изменение химического потенциала внутри уровня M , и для него на основе (1) можно написать уравнение

$$\int_0^{\varepsilon_F} \exp\left[-\frac{(\varepsilon - \varepsilon_M)^2}{2\Gamma^2}\right] d\varepsilon = \int_0^{\varepsilon_F} \exp\left[-\frac{(\varepsilon - \varepsilon_M)^2}{2\Gamma^2}\right] f(\varepsilon, \mu, T) d\varepsilon \quad (7)$$

Левая часть этого уравнения получается из (1) при $T = 0$. Для правой части (7) применяем разложение Зоммерфельда [9]

$$\int_0^{\varepsilon_F} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \approx \int_0^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon + \frac{\pi^2}{6} g'(\mu) T^2, \quad (8)$$

$$g(\varepsilon) = \exp\left[-\frac{(\varepsilon - \varepsilon_M)^2}{2\Gamma^2}\right].$$

Условие $T \ll \Gamma$ позволяет считать плотность состояний $g(\varepsilon)$ медленно меняющейся функцией по сравнению с $f(\varepsilon, E)$. Вычислив интеграл, сохранив первый член разложения по степеням $x = \mu - \varepsilon_F$, после некоторых упрощений имеем

$$\mu \approx \varepsilon_F + \frac{\pi^2}{6} (\varepsilon_F - \varepsilon_M) \left(\frac{T}{\Gamma}\right)^2, \quad T \ll \Gamma, \quad \mu \sim \varepsilon_F. \quad (9)$$

Из этой формулы следует, что в случае $\varepsilon_F > \varepsilon_M$ химический потенциал квадратично растет с температурой, в противном случае, когда $\varepsilon_F < \varepsilon_M$, он уменьшается. Это связано с поведением плотности состояний $g(\varepsilon)$, которая монотонно растет, когда $\varepsilon_F < \varepsilon_M$, уменьшается, если $\varepsilon_F > \varepsilon_M$.

Формула (9) предсказывает низкотемпературное поведение химического потенциала при известном значении энергии Ферми ε_F . Чтобы найти ε_F как функцию чисел заполнения $\nu(n_s, B)$ необходимо решить уравнение (1) при $T = 0$. Вычислив интеграл, после некоторых упрощений имеем

$$\nu = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N \left[\operatorname{erf}\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_n}{\sqrt{2}\Gamma}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{\varepsilon_n}{\sqrt{2}\Gamma}\right) \right] \quad (10)$$

Если учесть, что нижние уровни $n < M$ практически заполнены полностью, суммирование в (10) упрощается, и имеем

$$\nu = M + \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf}\left(\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_M}{\sqrt{2}\Gamma}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{\varepsilon_M}{\sqrt{2}\Gamma}\right) \right], \quad M = [\nu]. \quad (11)$$

Наконец, при заданном значении ν зависимость $\mu(T)$ можно найти из системы уравнений (9) и (11) (исключив ε_F численно).

График этой зависимости показан на рис. 2 (точки). Также на рис. 2 представлены температурные зависимости химического потенциала, найденные численным решением уравнения (1) при $\Gamma = 0.6$ meV для различных значений чисел заполнения ν .

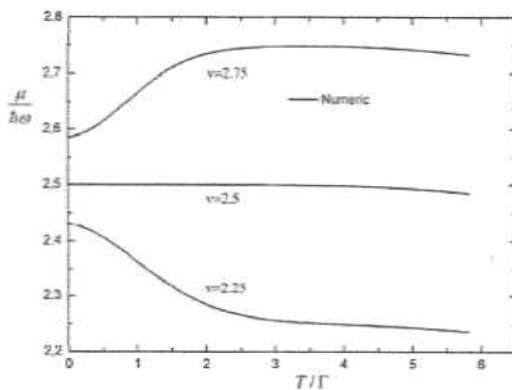


Рисунок 2. Зависимость химического потенциала 2D-электронного газа от температуры для трех значений чисел заполнения $\nu = 2.25, 2.5, 2.75$.

Из графика видно, что при достаточно низких температурах $T \ll \Gamma$, когда энергия Ферми лежит внутри уровня Ландау, электронный газ действительно ведет себя металлически. При больших температурах $T \gg \Gamma$ влияние уширения уровня незаметно. С дальнейшим ростом температуры, химический потенциал медленно уменьшается. Это связано с тепловым переходом электронов между уровнями Ландау, его интенсивность экспоненциально мала $\sim \exp(-\hbar\omega/T)$.

V. Температурная зависимость заселенности уровни Ландау

При изменении температуры меняются относительные заселенности уровней Ландау. С помощью уравнения (6) можно определить заселенности каждого уровня в зависимости от T , Γ , ν . Графики этих зависимостей представлены на рис. 3, где энергия Ферми лежит вблизи второго уровня Ландау.

Поскольку $\Gamma > 0$, на данном уровне возможно внутриуровневое тепловое возбуждение, которое на графике не проявляется. Когда $T < \Gamma$, в графиках зависимость заселенности уровней от температуры не наблюдается из-за экспоненци-

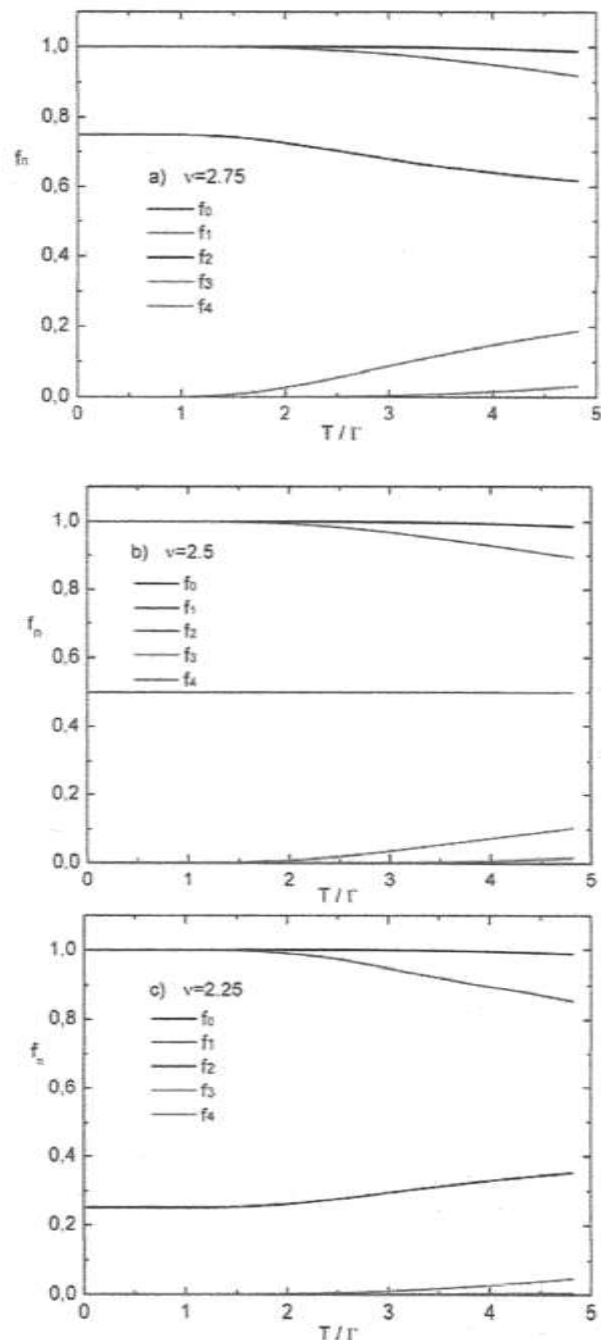


Рисунок 3. Зависимости относительных заселенностей уровней Ландау от температуры для трех значений чисел заполнения $\nu = 2.75$ (a), 2.5 (b), 2.25 (c) для GaAs. Принято: $m^* = 0.067 m_0$, $n_S = 0.36 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, $\Gamma = 0.5$ meV.

альной малости $\sim \exp(-\hbar\omega/T)$. Она проявляется в области $T > \Gamma$, причем характер изменений зависит от значений чисел заполнения ν данного (второго) уровня. Зависимость от температуры

заселенности уровней f_n , в основном, наблюдается для 2-го уровня и соседних ему 1-го и 3-го уровней.

В случае (а) второй уровень Ландау заполнен больше половины, $\nu = 2.75$, энергия Ферми лежит выше второго энергетического уровня $\epsilon_F > \epsilon_2$. С ростом температуры, начиная с $T \geq T$, доминируют тепловые переходы между уровнями $\epsilon_2 \rightarrow \epsilon_3$. При этом, как видно из рис. 3(а), заселенность 2-го уровня f_2 уменьшается, а 3-го уровня f_3 растет, заселенность 1-го уровня начинает меняться позднее. Причина наблюдения такой картины заключается в следующем: интенсивность тепловых переходов пропорциональна заселенности начальных f_i и количеству свободных конечных f_F состояний. Поэтому тепловые переходы $2 \rightarrow 3$ интенсивнее, чем переходы $1 \rightarrow 2$.

Аналогично можно судить и о случае (с), (рис. 3), в котором 2-й уровень заполнен менее половины $\nu = 2.25$. Здесь тепловые переходы $1 \rightarrow 2$ интенсивнее, чем переходы $2 \rightarrow 3$, и поэтому они проявляются раньше при температурах $T \geq T$.

В случае (b) (рис. 3) 2-й уровень заполнен ровно наполовину $\nu = 2.5$. Интенсивности тепловых переходов $1 \rightarrow 2$ и $2 \rightarrow 3$ равны. Число электронов, покидающих 2-й уровень и переходящих на 3-й уровень, полностью компенсируется электронами, переходящими из 1-го. Поэтому заселенность 2-го уровня f_2 не меняется с температурой.

VI. Заключение

В данной работе кратко рассмотрено изменение химического потенциала при фиксированном значении магнитного поля, $\mu(T)|_B$, при различных значениях фактора заполнения ν в широком интервале температур. Наряду с численными результатами, приводятся и сравниваются низкотемпературная аналитическая формула (см. рис. 2).

Отметим, что низкотемпературная формула, описывающая зависимости $\mu(T/\Gamma, \epsilon_F)$ (9) на основе разложения Зоммерфельда, найдена и использована для обсуждения осцилляции теплоемкости в работе [10]. Эта формула предсказывает низкотемпературное поведение химического потенциала при известном значении энергии Ферми ϵ_F . Мы привели и уравнение (10),

которое выражает ϵ_F через числа заполнения $\nu(n_s, B)$. Это уравнение является трансцендентным, дальнейшие упрощения нами не удались.

Представлены также графики зависимости от температуры заселенности уровня Ландау для различных значений фактора заполнения (см. рис. 3). Обсуждены причины проявления таких зависимостей.

Метаданные

The temperature dependence of the chemical potential and the population of the Landau levels of two dimensional electron gas in constant magnetic field

B.T. Abdulazizov

Physical-Technical Institute, Uzbekistan Academy of Sciences, Chingiz Aytmatov street 2B, 100084, Tashkent, Uzbekistan

A numerical calculation of the temperature dependence of the chemical potential for various values of the filling factor ν of the Landau level is carried out. The degree of filling of each Landau level is found as a function of temperature. A low-temperature formula for the dependence of $\mu(T/\Gamma, \epsilon_F)$ based on the Sommerfeld expansion is also given. The influence of the intra- and interlevel thermal excitations on changes in the chemical potential with temperature is discussed.

Keywords: heterostructure, quantum well, two dimensional electron gas, Landau level population, magnetic oscillations, chemical potential, expansion of Sommerfeld, inter- and intralevel excitations

Литература (References)

- [1] T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern. Electronic properties of two-dimensional systems. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [2] L.L. Chang. Electron properties of semiconductor heterostructures in magnetic field. In: *Molecular Beam Epitaxy and Heterostructures*, edited by L.L. Chang and K. Ploog (Martinus Nijhoff, Dordrecht, 1985).
- [3] M. Grundmann. *The Physics of Semiconductors. An Introduction Including Devices and Nanophysics* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg 2006), p 689.
- [4] E. Gornik, R. Lassnig, G. Strasser, H.L. Stormer, A.C. Gosard, and W. Wiegmann. Specific heat of two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs multilayers. *Physical Review Letters* **54**, No.16, 1820-1823 (1985).
- [5] A.C.A. Ramos, G.A. Farias, N.S. Almeida. Thermodynamics of a quasi-two dimensional electron gas: Effects of magnetic fields, temperature and finite width. *Physics E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures* **43**, 1878-1881 (2011).
- [6] W. Zawadzki, R. Lassnig. Magneto-thermal effect and thermoelectric power of two-dimensional electron gas in a

- quantizing magnetic field. *Surface Science* **142**, 225-235 (1984).
- [7] Cristine Villagonzalo, Rayda Gammag. The intrinsic features of the specific heat at half-filled Landau levels of two-dimensional electron systems. *J. Low-Temp. Phys.* **163**, 43-52 (2011). doi 10.1007/s10909-010-0259-3
- [8] I. Fezai, S. Jaziri. Thermodynamic properties of Landau levels in InSb two-dimensional electron gas. *Superlattices and Microstructures* **59**, 60-65 (2013).
- [9] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. *Solid State Physics* (Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976).
- [10] L. Wang. Magneto-oscillations in a two-dimensional electron gas: a simplified analytic formulation. *Physics Letters* **2**, No.2, 191-197 (1989).

Доирий магнит майдонида икки ўлчамли электрон газининг кимёвий потенциали ва Ландау сатҳларига температурани боғлиқлиги

Б.Т.Абдулазизов

ЎзР ФА Физика-техника институти, Ч. Айтматов кўчаси 26, 100084, Тошкент, Ўзбекистон

Ландау сатҳини тўлдириш фактори ν нинг турли қийматларида кимёвий потенциални температурага боғланишини сонли ҳисоблари ўтказилган. Температуранга боғлиқ равишда ҳар бир Ландау сатҳини тўлдирилиш даражаси топилган. Зоммерфельд ёйилмаси асосида паст температураларда $\mu(T/T_F, e_F)$ боғланиши формуласи ҳам келтирилган. Ландау сатҳлари ичидаги ҳамда сатҳлараро иссиқлик уйғонишларини кимёвий потенциалга ва қаралаётган системани сатҳларини тўлдирилиш даражасига таъсири муҳокама қилинган.

Калит сўзлар: гетероўтишлар, квант ўра, икки ўлчамли электрон газ, Ландау сатҳлари, магнит осцилляцияси, сатҳлар кенглиги, кимёвий потенциал, Зоммерфельд ёйилмаси, сатҳлараро уйғонишлар, сатҳлар ичидаги уйғонишлар, сатҳлар тўлаллиги.

Анизотропия транспортных и магнитотранспортных свойств эпитаксиальных слоев GaMnAs, полученных методом низкотемпературной молекулярно-лучевой эпитаксии

П.Б. Парчинский^{1*}, А.А. Насиров¹, А.С. Газизулина¹, А. Арсланов¹, Dojin Kim²,
О.М. Турсункулов³

¹ Национальный университет Узбекистана, ул. Университетская 4, 100176, Ташкент, Узбекистан

² Chungnam National University, Yuseong-ku, 305-764, Taejeon, Korea

³ Центр передовых технологий, ул. Университетская 7, 100174, Ташкент, Узбекистан

Получена 27.07.2021

* Corresponding author: e-mail pavelphys@mail.ru, Phone: +998935405759

В настоящей работе приводятся результаты измерения температурной зависимости сопротивления твердых растворов $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ со значением $x=0.0156$. Установлено, что температурные зависимости сопротивления, измеренные вдоль кристаллических осей $[110]$ и $[\bar{1}\bar{1}0]$ в области температур ниже 150 К, носят существенно различный характер. Показано, что при температурах ниже температуры Кюри данные различия могут быть связаны с анизотропией магнитных свойств эпитаксиального слоя $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, тогда как при температурах выше температуры Кюри, наблюдаемые различия могут быть связаны с анизотропией подвижности носителей заряда, возникающей из-за наличия в объеме эпитаксиального слоя пространственно ориентированных структур.

Ключевые слова: молекулярно-лучевая эпитаксия, GaMnAs, магнетосопротивление, ферромагнитное упорядочения, анизотропия.

The temperature dependence of a resistance in solid solution $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ with the $x=0.0156$ have been presented. It was established that the temperature dependence of the resistance measured along the crystal axes $[110]$ and $[\bar{1}\bar{1}0]$ in the temperature range below 150 K are significantly different. It was shown that at the temperatures below the Curie temperature observed difference can be associated with the anisotropy of the magnetic properties of the $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ epitaxial layer, whereas at temperatures above the Curie temperature it may be related to the anisotropy of the mobility of charge carriers that occurs due to the presence of spatially oriented structures in the volume of the epitaxial layer.

Keywords : molecular beam epitaxy, GaMnAs, magnetoresistance, ferromagnetic state, anisotropy.

<https://doi.org/10.52304/ujp.23i2.236>

I. Введение

С момента открытия перехода ферро-магнетик-парамагнетик в твердых растворах $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, полученных методом низкотемпера-

турной молекулярно-лучевой эпитаксии (НТ МЛЭ), $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ привлекает значительное внимание исследователей, работающих в области полупроводникового материаловедения. Одним

из наиболее интересных эффектов, наблюдаемых в эпитаксиальных слоях $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, является анизотропия их магнитных и магнитотранспортных характеристик. Несмотря на то, что исследованию анизотропии в $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ посвящено значительное количество оригинальных экспериментальных работ и обзоров, в большинстве из них исследуется анизотропия свойств $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, находящегося в состоянии ферромагнитного упорядочения. Хотя природу возникновения эффектов анизотропии в $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ нельзя считать окончательно установленной, в работах [1-4] показано, что возникновение анизотропии магнитных и магнитотранспортных свойств $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ связано с возникновением в объеме эпитаксиального слоя пространственно-ориентированных структур. Наличие таких структур позволяет предположить, что эффекты анизотропии могут наблюдаться в $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ и за пределами состояния ферромагнитного упорядочения.

В данной работе приводятся результаты исследования анизотропии транспортных и магнитотранспортных характеристик эпитаксиальных слоев $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ при температурах, лежащих по обе стороны от температуры Кюри (T_C), при которой наблюдается переход $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ в состояние ферромагнитного упорядочения.

II. Исследуемые образцы и методика эксперимента

Эпитаксиальные слои $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, исследуемые в данной работе, были получены при помощи метода НТ МЛЭ на полужондировой подложке GaAs с кристаллографической ориентацией (001). Перед выращиванием эпитаксиального слоя $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ на подложке GaAs при температуре 620°C выращивался буферный слой GaAs. После этого температура подложки опускалась до 275°C, и начиналось выращивание основного эпитаксиального слоя $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$. Температура эффузионной ячейки Mn в процессе выращивания составляла 860°C. Концентрацию примеси Mn в исследуемых образцах определяли с помощью электронно-зондового микроанализа, которая составила 0.78 ат.%, что соответствует значению $x=0.0156$. Толщина исследуемых образцов составляла 300 нм. В целом технология получения эпитаксиальных слоев соответствовала описанной в [5].

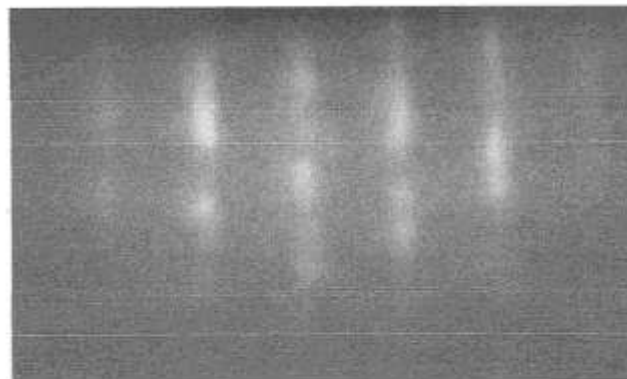


Рисунок 1. Дифракционная картина, полученная в процессе роста эпитаксиальной пленки $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ методом ОБЭ.

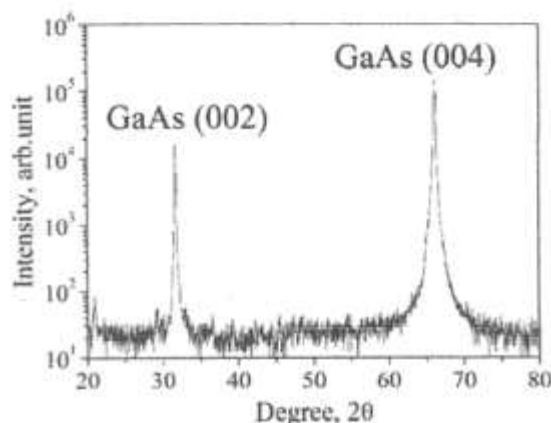


Рисунок 2. Рентгенограмма исследуемых слоев $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$.

Однородность эпитаксиального слоя $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ в процессе его роста контролировали с помощью метода дифракции отраженных быстрых электронов. Полученные дифрактограммы показаны на рис. 1, они представляют собой систему полосовых рефлексов, что, согласно [6, 7], свидетельствует о структурной однородности растущего эпитаксиального слоя. Исследования, проведенные с помощью рентгеноструктурного анализа, показали, что в спектрах исследованных образцов наблюдаются только рефлексы, соответствующие отражениям от атомных плоскостей GaAs (002) и GaAs (004) (рис. 2). Таким образом, данные рентгеноструктурного анализа также свидетельствуют, что образцы являются однородными и не содержат включений других фаз.

Измерения транспортных и магнитотранспортных свойств исследуемых эпитаксиальных слоев проводили четырёхзондовым методом в

геометрии Ван-дер Пау, что позволило проводить измерения сопротивления, магнетосопротивления и эффекта Холла в едином измерительном цикле. Измерения магнетосопротивления и эффекта Холла проводили при ориентации магнитного поля перпендикулярно к поверхности образца.

Концентрация основных носителей заряда в исследуемых эпитаксиальных слоях, определённая при температуре 300 К из измерений эффекта Холла, составила 7×10^{18} . Значение температуры Кюри (T_C) исследуемых слоев определяли согласно [8] из измерений аномального эффекта Холла, которое составило 50 К [9].

III. Результаты и обсуждение

На рис. 3 представлены данные измерения температурной зависимости удельного сопротивления исследуемых образцов, измеренные вдоль кристаллических осей $[110]$ и $[1\bar{1}0]$.

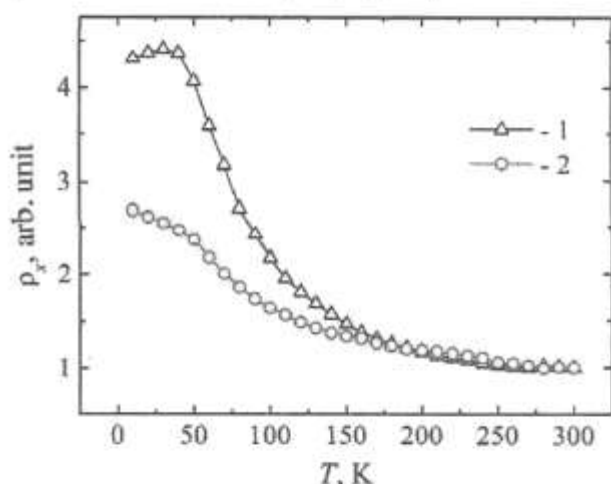


Рисунок 3. Температурная зависимость удельного сопротивления, измеренная вдоль осей $[1\bar{1}0]$ (кривая 1) и $[110]$ (кривая 2).

Чтобы исключить влияние размерных эффектов, связанных с различием расстояния между контактами, результаты измерения представлены в виде величины $\rho_x(T)$, определяемой как

$$\rho_x(T) = R(T)/R(300), \quad (1)$$

где $R(300)$ – это сопротивление, определённое при 300 К.

Из представленных зависимостей видно, что при температурах ниже 150 К в характере температурных зависимостей величины ρ_x наблюдаются как количественные, так и качественные различия. Так, в интервале температур 20–150 К,

сопротивление, измеренное вдоль оси $[110]$, с понижением температуры увеличивается значительно быстрее, чем сопротивление, измеренное вдоль оси $[1\bar{1}0]$. Кроме того, при температурах, близких к T_C , на зависимости $\rho_x(T)$, определённой вдоль оси $[110]$, присутствует локальный максимум, тогда как на зависимости $\rho_x(T)$, определённой вдоль оси $[1\bar{1}0]$, при тех же температурах наблюдается лишь перегиб, сопровождающийся замедлением роста сопротивления с понижением температуры. Таким образом, на температурных зависимостях $\rho_x(T)$, определённых для кристаллических осей $[110]$ и $[1\bar{1}0]$ можно выделить две области – область количественных различий, наблюдающаяся в интервале температур от T_C до 150 К и область качественных различий, наблюдаемая в интервале температур от 20 К до T_C .

Рассмотрим возможные механизмы возникновения наблюдаемой нами анизотропии зависимости $\rho_x(T)$. На наш взгляд, анизотропия величины $\rho_x(T)$, наблюдаемая в интервале температур от 20 К до T_C , может быть связана с анизотропией магнитных свойств твердого раствора $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, находящегося в состоянии ферромагнитного упорядочения. Возникновение спонтанной намагниченности в $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ может приводить к возникновению магнетосопротивления, величина и знак которого зависят от угла между направлением вектора спонтанной намагниченности и направлением протекания электрического тока. Согласно литературным данным [3, 10], ось легчайшего намагничивания, следовательно, и вектор спонтанной намагниченности, в эпитаксиальных слоях $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, выращенных на подложках GaAs, лежит в плоскости эпитаксиального слоя. Поэтому в состоянии ферромагнитного упорядочения вектор намагниченности образца может находиться под различными углами к осям $[110]$ и $[1\bar{1}0]$. Отметим, что величина этого угла может изменяться с температурой и зависит от соотношения эффектов, связанных с одноосной и двуосной анизотропией в эпитаксиальных слоях $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$.

Таким образом, токи, протекающие вдоль кристаллографических направлений $[110]$ и $[1\bar{1}0]$, могут быть различным образом ориентированы по отношению к вектору спонтанной намагниченности, что может определять различный характер температурной зависимости $\rho_x(T)$ при температурах ниже T_C .

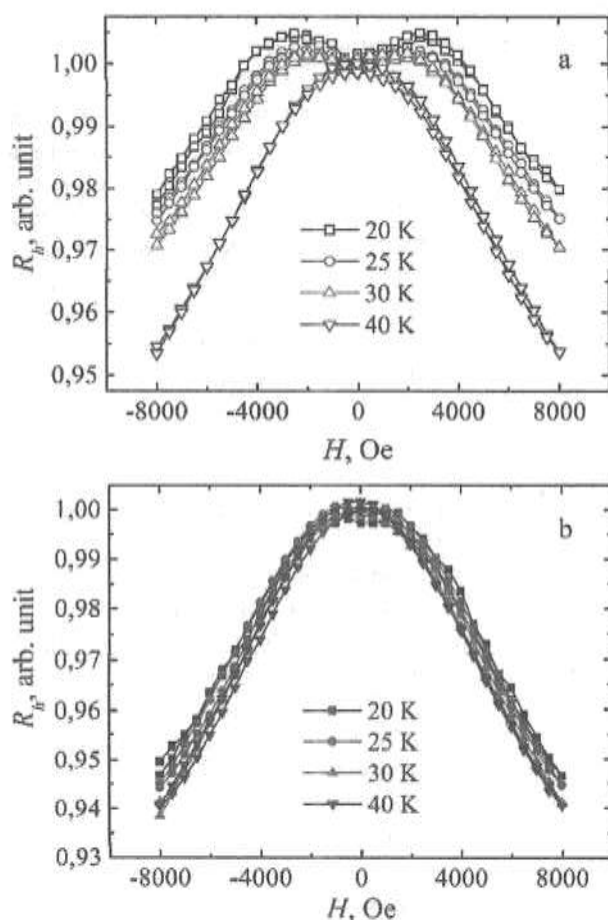


Рисунок 4. Магнетосопротивление исследуемых слоев $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, находящихся в состоянии ферромагнитного упорядочения: *a* – определенное вдоль оси $[1\bar{1}0]$, *b* – определенное вдоль оси $[110]$.

О наличии анизотропии магнитных свойств исследуемых эпитаксиальных слоев, находящихся в состоянии ферромагнитного упорядочения, свидетельствуют приведенные на рис. 4 результаты измерения магнетосопротивления, проведенные вдоль кристаллографических осей $[110]$ и $[1\bar{1}0]$. Для удобства представления величина магнетосопротивления характеризовалась величиной R_H , определяемой как

$$R_H = R(H) / R(0), \quad (2)$$

где $R(0)$ – значение сопротивления, определенное при нулевой напряженности магнитного поля, а $R(H)$ – значение сопротивления, определенное при значении магнитного поля равно H . В таком представлении положительному магнетосопротивлению соответствует величина $R_H > 1$, а отрицательному величина $R_H < 1$.

Из представленных зависимостей видно, что магнетосопротивление исследуемых эпитаксиальных слоев существенным образом зависит от кристаллографического направления. Так для направления $[1\bar{1}0]$ в области полей до 2000 Эрстед наблюдается положительное магнетосопротивление, тогда как для направления $[110]$ положительное магнетосопротивление отсутствует, однако в области полей до 2000 Э наблюдается плато величины R_H . Эти результаты подтверждают сделанное ранее предположение о том, что анизотропия величины $\rho_x(T)$ эпитаксиального слоя $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ при температурах ниже T_C может быть связана с анизотропией его магнитных свойств.

Однако при температурах выше T_C , когда исследуемые эпитаксиальные слои находятся в парамагнитном состоянии, различия в виде зависимостей $\rho_x(T)$, определенных вдоль различных кристаллических осей, не могут быть объяснены анизотропией магнитных свойств твердых растворов $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$. На наш взгляд, наблюдаемый в интервале температур 50–150 К эффект анизотропии температурной зависимости удельного сопротивления исследуемых эпитаксиальных слоев может быть связан с наличием в их объеме ранее упомянутых пространственно-ориентированных структур. Природа формирования таких структур остается к настоящему времени окончательно не установленной, но можно предположить, что они обусловлены наличием преференциальных направлений встраивания примеси Mn в матрицу GaAs в процессе роста эпитаксиального слоя [1]. При этом может возникать неоднородность распределения примеси Mn вдоль различных кристаллографических направлений (даже таких, которые для кристаллического GaAs являются эквивалентными).

В случае наличия неоднородного распределения примеси Mn вдоль кристаллических осей $[110]$ и $[1\bar{1}0]$ обнаруженные различия в температурных зависимостях $\rho_x(T)$, определенных вдоль этих кристаллических осей, на наш взгляд, могут быть связаны с анизотропией температурной зависимости подвижности носителей заряда μ . Известно, что температурная зависимость подвижности носителей заряда в сильнолегированных полупроводниках определяется процессами рассеяния носителей заряда на колебаниях кристаллической решетки (фононах) и ионизированных примесях [11, 12]. При рассеянии на фононах

температурная зависимость μ может быть описана формулой

$$\mu(T) = AT^p, \quad (3)$$

где A – коэффициент, не зависящий от температуры, p – показатель степени, равный $(-1/2)$ или $(-3/2)$ в зависимости от доминирующего механизма фононного рассеяния. Рассеяние на ионизированной примеси описывается формулой Брукса-Хердинга [11], которая может быть записана как

$$\mu(T) = \frac{BT^{3/2}}{N_i \ln(CT)}, \quad (4)$$

Здесь B и C – постоянные коэффициенты, N_i – концентрация рассеивающих центров. Из формулы (4) следует, что интенсивность процессов рассеяния и вид зависимости $\mu(T)$ зависит от среднего расстояния между рассеивающими центрами, в качестве которых в исследуемых образцах выступают атомы Mn в подрешетке Ga.

Процессы фононного рассеяния преобладают при более высоких температурах, тогда как рассеяние на ионизированных примесях становится доминирующим в области низких температур [12, 13]. Так, в GaAs, сильно легированного висмутом, рассеяние дырок на ионизированных примесях становится доминирующим при температурах ниже (80–120) К в зависимости от уровня легирования [14].

Исходя из сказанного, можно предположить, что в исследуемых слоях $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ при температурах выше 150 К доминируют процессы фононного рассеяния, при которых неоднородность распределения примеси не сказывается на характере рассеяния носителей заряда и рассеяние носителей заряда является изотропным. Поэтому в этой области подвижность, измеренная вдоль эквивалентных кристаллических направлений, при изменении температуры будет меняться одинаковым образом. При температурах ниже 150 К вклад рассеяния на ионизированных примесях в зависимость $\mu(T)$ становится доминирующим, поэтому неоднородность распределения примеси вдоль различных кристаллических осей может приводить к анизотропии процессов рассеяния носителей заряда и, как следствие, к наблюдаемым различиям в характере температурной зависимости их подвижности вдоль различных кристаллографических направлений. Тот факт, что зависимость $\rho_x(T)$ вдоль оси $[110]$ выражена сильнее, чем вдоль оси $[1\bar{1}0]$ с учетом выше сказанного может

свидетельствовать о том, что данное направление является преференциальным при встраивании атомов Mn в полупроводниковую матрицу растущего эпитаксиального слоя $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$.

IV. Заключение

Таким образом, проведенные нами исследования показали наличие анизотропии электрофизических свойств слоев $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, полученных методом НТ МЛЭ, проявляющейся в различии температурной зависимости удельного сопротивления, измеренного вдоль кристаллографических направлений $[110]$ и $[1\bar{1}0]$. При этом характер наблюдаемых эффектов различен при температурах больших и меньших T_C . При температурах меньших T_C анизотропия различий в виде зависимости $\rho_x(T)$ связана, по-видимому, с анизотропией магнитных свойств $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$, находящегося в состоянии ферромагнитного упорядочения, тогда как при температурах больших T_C , различия в виде зависимости $\rho_x(T)$ определяются анизотропией зависимости $\mu(T)$, которая появляется вследствие возникновения в объеме растущего эпитаксиального слоя $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ пространственно-ориентированных структур, связанных с неоднородностью распределения примеси Mn вдоль различных кристаллических направлений.

Метаданные

Anisotropy of transport and magnetotransport properties of GaMnAs epitaxial layers obtained by low-temperature molecular beam epitaxy

P.B. Parchinskiy¹, A.A. Nasirov¹, A.S. Gazizulina¹, A. Arslanov¹, Dojin Kim², O.M. Tursunkulov³

¹ National University of Uzbekistan, Universitetskaya 4, 100176, Tashkent, Uzbekistan

² Chungnam National University, Yuseong-ku, 305-764, Taejeon, Korea

³ Center of Advanced Technologies, Universitetskaya st. 7, 100174, Tashkent, Uzbekistan

The temperature dependence of a resistance in solid solution $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ with the $x=0.0156$ have been presented. It was established that the temperature dependence of the resistance measured along the crystal axes $[110]$ and $[1\bar{1}0]$ in the temperature range below 150 K are significantly different. It was shown that at the temperatures below the Curie temperature observed difference can be associated with the anisotropy of the magnetic properties of the $\text{Ga}_{(1-x)}\text{Mn}_x\text{As}$ epitaxial layer, whereas at temperatures above the Curie temperature it may be related to the anisotropy of the mobility of charge carriers that occurs due to

the presence of spatially oriented structures in the volume of the epitaxial layer.

Keywords: molecular beam epitaxy, GaMnAs, magnetoresistance, ferromagnetic state, anisotropy.

Литература (References)

- [1] U. Welp, V.K. Vlasko-Vlasov, A. Menzel, H.D. You, X. Liu, J.K. Furdyna, T. Wojtowicz. *Appl. Phys. Lett.* **85**, 260 (2004).
- [2] S. Piano, X. Marti, A. W. Rushforth, K. W. Edmonds, R.P. Campion, M. Wang, O. Caha, T.U. Schüllli, V. Holý, B.L. Gallagher. *Appl. Phys. Lett.* **98**, 152503 (2011).
- [3] U. Welp, V.K. Vlasko-Vlasov, X. Liu, J.K. Furdyna, T. Wojtowicz. *Phys. Rev. Lett.*, **90**, 167206 (2003).
- [4] A.S. Gazizulina, A.A. Nasirov, A.A. Nebesniy, P.B. Parchinskiy, Dojin Kim. *Fizika i tehnika poluprovodnikov* **55**, №2, 159 (2021).
- [5] I.T. Yoon, T.W. Kang, K.H. Kim and D.J. Kim, *J. Appl. Phys.* **95**, 3607 (2004).
- [6] T. Hayashi, M. Tanaka, T. Nishinaga, H. Shimada, H. Tsuchiya, Y. Otuka. *J. Cryst. Growth* **175-176**, 1063 (1997).
- [7] M. Tanaka. *J. Vac. Sci. Technol. B* **16**, 2267 (1998).
- [8] K.W. Edmonds, K.Y. Wang, R.P. Campion, A.C. Neumann, C.T. Foxon, B.L. Gallagher, P.C. Main, *Appl. Phys. Lett.* **81**, № 16, 3010-3012 (2002).
- [9] B. Parchinskiy, A.S. Galashina, D. Kim. *Uzbekskiy fizicheskiy zhurnal* **19**(3), 143 (2017).
- [10] H. Ohno. *Physica E* **6**, 702 (2000).
- [11] V.L. Bonch-Bruевич, S.G. Kalashnikov. *Fizika poluprovodnikov* (Nauka, Moskva, 1990).
- [12] Dzh. Bleykмор. *Fizika tverdogo tela* (Mir, Moskva, 1988).
- [13] P.S. Kireev. *Fizika poluprovodnikov* (Vysshaya Shkola, Moskva, 1973).
- [14] D.A. Beaton, R.B. Lewis, M. Masnadi-Shirazi, T. Tiedje, *J. Appl. Phys.* **108**, 083708 (2010).

Паст ҳароратли молекуляр эпитаксия орқали олинган GaMnAs эпитаксиал қатламларининг транспорт ва магнетотранспорт хусусиятларининг анизотропияси

П.Б. Парчинский¹, А.А. Насиров¹, А.С. Газизулина¹, А. Арсланов¹, Dojin Kim², О.М. Турсункулов³

¹ Ўзбекистон Миллий университети, Университет кўч. 4, 100176, Тошкент, Ўзбекистон

² Chungnam National University, Yuseong-ku, 305-764, Taejeon, Korea

³ Илғор технологиялар маркази, Университет кўч. 7, 100174, Тошкент, Ўзбекистон

Ушбу мақолада $x=0.0156$ қийматига ега бўлган $Ga_{(1-x)}Mn_xAs$ қаттиқ эритмаларининг қаршилигини температурага боғлиқлигининг ўлчаш натижалари келтирилган. 150 K дан паст температуралар оралиғида $[110]$ ва $[1\bar{1}0]$ кристаллографик ўқлар бўйлаб ўлчанган қаршилиқнинг температурага боғланиши турлича бўлиши кузатилган. Кюри температурасидан паст ҳароратларда, бу фарқлар $Ga_{(1-x)}Mn_xAs$ эпитаксиал

қатлам магнит хусусиятларининг анизотропияси билан боғлиқ бўлиши мумкин. Кюри температурасидан юқори ҳароратларда кузатилган фарқ эпитаксиал қатламнинг йўналишлар бўйича структуранинг бир хил бўлмаслиги ҳисобига келиб чиқадиган заряд ташувчилар ҳаракатчанлигининг анизотропияси билан боғлиқ бўлиши мумкин.

Калит сўзлар: молекуляр эпитаксия, GaMnAs, магнит қаршилиқ, ферромагнит ҳолат, анизотропия.

Single-walled carbon nanotube structure and radiation defects under the high energy electron beam

M.Yu. Tashmetov, I.I. Yuldashova*

Institute of Nuclear Physics, Academy of Sciences of Uzbekistan, Mirzo Ulugbek district, Ulugbek township, Khorasan 1, 100214, Tashkent, Uzbekistan

Received 29.08.2021

* Corresponding author: e-mail iroda@inp.uz, Phone: +998909972114

Исследовано влияние электронного облучения до флюенса 1.54×10^{17} электрон/см² на структурные параметры, размеры нанокристаллитов, микронапряжения и спектры комбинационного рассеяния однослойной углеродной нанотрубки (ОСУНТ). Облучение электронами приводит к увеличению параметров решетки в направлениях *a* и *b* от 4.7623 до 4.9378 Å и уменьшению по оси *c* от 3.9491 до 3.9469 Å. Электронное облучение стимулирует рост размера нанокристаллитов от 4.06 нм до 5.03 нм, приводит к сдвигу спектров комбинационного рассеяния в сторону более высоких частот и указывает на появление спектра 805 см⁻¹, вызванного образованием дефектов в ОСУНТ.

Ключевые слова: однослойные углеродные нанотрубки, электронный пучок, Раманская спектроскопия, рентгеноструктурный анализ, параметры ячейки.

The effect of electron irradiation up to fluence of 1.54×10^{17} electron/cm² on the structural parameters, sizes of nanocrystallites, microstrains, and Raman spectra of a single-walled carbon nanotube (SWCNT) was studied. Electron irradiation leads to an increase in the lattice parameters in the *a* and *b* directions from 4.7623 Å to 4.9378 Å and a decrease along the *c* axis from 3.9491 Å to 3.9469 Å. Electron irradiation stimulates the growth of the nanocrystallite size from 4.06 nm to 5.03 nm, leads to a shift of the Raman spectra towards higher frequencies, and indicates the appearance of a spectrum at 805 cm⁻¹, which is caused by the formation of defects in a SWCNT.

Keywords: Single-walled carbon nanotubes, e-beam, Raman spectroscopy, XRD – analysis, cell parameters.)

<https://doi.org/10.52304/v23i2.237>

I. Introduction

A carbon nanotube is a convenient model object with a simple structure, known locations and bonds of carbon atoms, metallic and (or) semiconducting conductivity. The results of a detailed study of a single-walled carbon nanotube make it possible to use them in the study of more complex multicomponent nanocompounds, in which nitrogen, oxygen, hydrogen atoms, and sometimes heavier atoms are “incorporated-present” as impurities. Distortions introduced by impurity atoms lead to a change in the

binding energy, displacement of carbon atoms from the ideal position, and can also initiate a change in symmetry.

Based on the relationship between the structure and properties of materials [1], it can be assumed that the introduction of defects (distortion, substitution) into a single-walled carbon nanotube (SWCNT) will lead to a change in its properties. It should be noted that the same changes can be made to the structure of a SWCNT under external influence (temperature,

pressure and irradiation). In some cases, exposure to radiation is the optimal and controllable way to study the formation of defects and their effect on symmetry, on the radial and tangential vibrations of carbon atoms, on the structure and properties of a carbon nanotube (CNT).

The structure of a SWCNT was investigated from the very beginning of its preparation [2], in which the existence of a unit cell with a hexagonal structure was revealed. In many samples, along with a SWCNT, graphite and impurities of metal catalysts are present.

The physical and chemical properties diversity of carbon nanomaterials are determined by the possibility of influencing their structure, as well as the generation of different defects [3, 4]. At [4] details the radiation defects that result from neutron flux and gamma irradiation exposure in the SWCNT. In it, the samples were irradiated with neutrons to 1.28×10^{17} n/cm² fluence and with gamma rays to 1.54×10^{17} ph/cm² fluence.

One of the methods to change properties of SWCNT is to generate radiation defects as a result of electron beam exposure. Electron bombardment is capable of creating radiation point defects, in contrast to the irradiation by low-energy photons, which are mainly used to excite π -electron systems, and can lead to the polarization of the molecules of the nanostructures. The electron irradiation of SWCNT is not only caused radiation defects, which will contribute to the degradation of nanotubes, herewith the crosslinking appears due to the ruptured bonds and generation of vacancies.

The structure, topology, and size of CNTs are a source of their outstanding mechanical and optical properties and their electronic behavior. Raman spectroscopy is a valuable technique for determining the diameter distribution, chirality, purity, and architecture of CNTs [3-19]. Vibrational properties, electronic structures, quality of the samples and diameter characterization of the various carbon materials can be analyzed by the Raman spectroscopy including SWCNT, double-walled (DWCNT) [9] and multi-walled (MWCNT) carbon nanotubes [3, 4, 17]. Changes in SWCNTs properties under irradiation with protons of various energies (1-18 MeV) and doses ($3.0 \times 10^{-7} \sim 2.2 \times 10^{-2}$ nC/ μm^2) were studied in [18] by using Raman spectroscopy. After the high-energy proton irradiation (~18 MeV) no significant change in Raman spectra was observed, however, after low-energy proton irradiations (1-6 MeV) some

of the semiconducting SWCNTs exhibited irradiation induced damage.

The most prominent Raman features in SWCNTs are the radial breathing modes (RBMs), the higher frequency D (disordered), G (graphite) and G' (second-order Raman scattering from D-band variation) modes [3]. Although the D, G, and G' modes are found in graphite, the RBM is specific to SWCNT and is representative of the isotropic radial expansion of the tube.

Authors of [5] reported about the influence of low energy e-beam (at 1 kV for 1 min, dosage 2.3×10^{21} to 3.1×10^{21} electron/cm²) focused on the single-walled carbon nanotube. After studying the effect of low-energy (100 keV) electron beam on the deposited hydrocarbon EBID and amorphous carbon during the synthesis of SWNTs, they concluded that the increase in D-mode electron beam in Raman spectra is mainly due to amorphous rather than structural damage of SWNTs. Authors of [20] found that SWCNTs exposed to focused electron beam were severely deformed locally and neck-like features were developed along the tube due to the removal of carbon atoms by knock-on displacements.

There are very few X-ray diffractometry (XRD) studies of carbon nanotubes so far, especially, SWCNTs and XRD analysis after the electron irradiation effects.

It follows from the above literature data that although the effect of gamma rays, protons, electrons, and ions on a SWCNT has been studied [10, 21, 22], a comprehensive study of the structure, microstress, atomic vibrations, nanotube diameter, and nanocrystallite size under electron irradiation of various fluencies has not been practically investigated. The purpose of the work is to determine the structure of SWCNT and to study radiation defects under exposure to high fluency of 2 MeV electron beam.

II. Experimental methods

We have used SWCNT nanopowder samples ($D \times L = 1.2-1.5 \text{ nm} \times 2-5 \text{ }\mu\text{m}$) produced by Electric Arc Discharge method at Sigma-Aldrich.

The samples were irradiated at the liner electron accelerator Electronics-U003 at the Institute of Nuclear Physics, Uzbekistan at the following e-beam parameters: electron energy 2 MeV, current density $0.17 \text{ }\mu\text{A/cm}^2$. The choice of such a value for the energy and current density of the electron beam is as-

sociated with the aim of avoiding heating of the sample, which leads to the appearance of an air impurity (oxygen, nitrogen) inside a single-walled carbon nanotube [23]. The samples were irradiated to integral fluences 1.2×10^{17} and 1.6×10^{17} electron/cm². Thermal effects can be observed when nanotubes are irradiated with high energy electrons to high doses. However in order to eliminate the thermal effects in samples, they were irradiated at small current and frequent stoppages. Then some relative changes were checked whether they are present or absent. Samples were inspected 1 hour after irradiation, 1 day after, 1 month and 5 months after and no change was observed [14].

The SWCNTs were characterized by Raman spectroscopy (Renishaw in Via Raman microscope) using a 532 nm laser excitation source operated at 10 mW over a range 100–3200 cm⁻¹ and using a 1800 l/mm(vis) grating. The XRD technique (Panalytical Empyrean 3) was used to characterize structure of SWCNT following modes: X-ray voltage 40.0 kV, current 45.0 mA, scanning range $2\theta_B = 20^\circ$ – 120° , scanning speed 2 deg/min and step size $2\theta = 0.013^\circ$.

III. Experimental results and discussion

III.1. X-ray diffraction

The diffraction patterns were obtained from the raw XRD spectra by treatment with the Ritveld method using the Fullprof program (Fig. 1.).

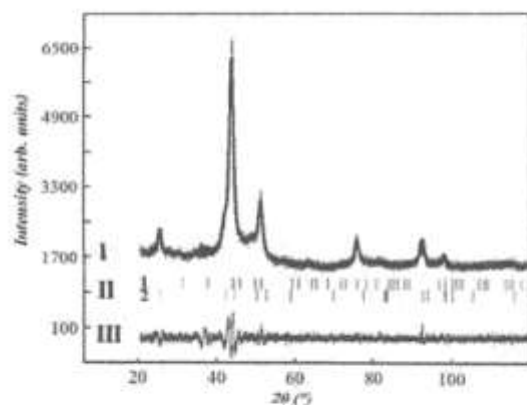


Figure 1. X-ray diffraction pattern of initial SWCNT structure. I – the difference between experimental and fitted data, II – the peaks was found calculation, III – comparison of the experimental data with the fitted data using the resolution function of the diffractometer.

Many space groups ($Fd\bar{3}m$, $P6_3/mmc$, $P6_3/mc$, $P6/mmm$, $R\bar{3}m$) were studied and it was found space group of SWCNT sample. SWCNT space

group consist of two phases: $P6/mmm$ and $P6_3/mc$ ($\chi^2=2.09$). When the sample was analyzed as single-phase the χ^2 (Bragg contrib.) was 10.7, the Bragg R -factor was 82.3, R_F -factor was 92.2.

The samples were irradiated with 1.18×10^{17} and 1.54×10^{17} electron/cm² fluency and the structure parameters were calculated (Tabl. 1).

Table 1. Initial and irradiated cell parameters of SWCNT. Phase 1 is SWCNT and Phase 2 is graphite.

Fluence, electron/cm ²	a, b (Å)		c (Å)	
	Phase1	Phase2	Phase1	Phase2
0	4.7623	2.4630	3.9491	6.9538
1.18×10^{17}	4.8286	2.4647	3.9394	6.8383
1.54×10^{17}	4.9378	2.5022	3.9469	6.9878

At $2\theta_B=44^\circ$ 2 phases correspondent, (200) and (111) Bragg peaks from the first phase, (101) peak from the second phase (Fig. 2, top). The (111) and (101) peak intensity share are equal 0.

After different by high e-beam irradiation all the experimental XRD patterns were compared and only (200) diffraction peaks was clearly decreased and shifted to higher angles with increasing the irradiation fluence, which can be summarized as the nanoparticle size growth (Fig. 2, bottom).

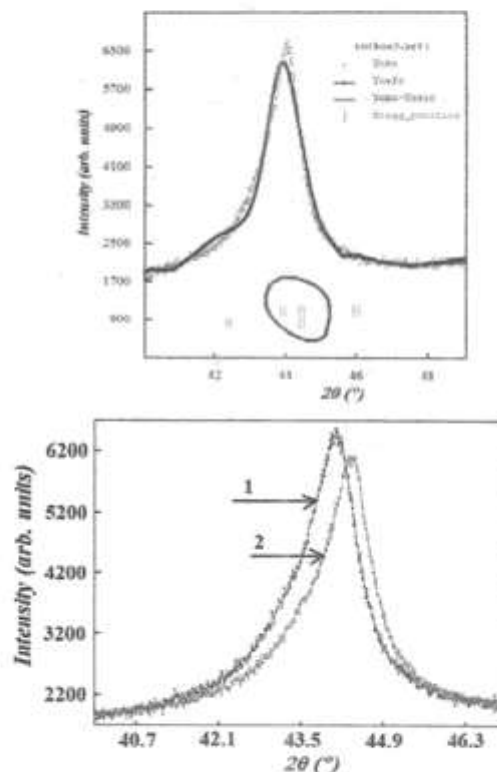


Figure 2. The XRD patterns of the initial (1) and irradiated (2) samples at the reflection (002).

C-C bond lengths of SWCNT was calculated (Tabl. 2) using the Fullprof program.

Table 2. C-C bond lengths of SWCNT for pristine and post irradiation sample.

Fluence, electron/cm ²	a_{C1-C2} , Å	a_{C1-C3} , Å	a_{C1-C4} , Å
0	1.453	2.749	3.109
1.54×10^{17}	1.452	2.851	3.199

III.2. Raman scattering

The radial breathing mode (RBM) bands are a useful diagnostic tool for confirming the presence of SWCNTs as well as depend on chirality and diameter of SWCNTs. The RBM frequency is inversely proportional to the diameter of the tube, making it an important feature for determining the diameter distribution in a sample and calculated using the expression $\omega_{RBM} = A/d_t + B$, where A and B are determined experimentally [6], in [24] authors choice has a very good quantitative agreement with other calculations

$$\omega_{RBM} = \frac{227}{d_t} \sqrt{1 + C_{env} d_t^2(1)}, \quad (1)$$

where C_{env} quantifies the effect of the environment on the RBM frequency and for most samples in the literature present 0.056 nm^{-2} [24]. The RBM bands of SWCNT were observed at 169 cm^{-1} and 168 cm^{-1} for pristine and post irradiation accordingly. From the (1) equation was calculated the value of d_t : 1.42 nm for pristine sample (Fig. 3a), 1.43 nm for irradiation sample at $1.54 \times 10^{17} \text{ electron/cm}^2$ (Fig. 3b).

According to the nanotube diameters found through the RBM bands, the chiral indices of the nanotube were found to be for the pristine (18,0) and for the post-irradiated (15,5) [25]. Armchair type is always metallic ($n=m$) and the other two types, Zigzag ($n=0$ or $m=0$) and Chiral ($n \neq m$) can be either metallic or semiconductor depending on their chiral condition [26]. If $(n-m)$ is divisible by 3 then the tube is metallic and if $(n-m)$ is not divisible by 3 then the tube is a semiconductor. From this dependence it can be said that the pristine sample is a metal, the irradiated sample is a semiconductor.

As seen in RBM spectra distinct spectral intensity decrease was observed.

The G band is a tangential share mode of carbon atoms that corresponds to the stretching mode in the graphite plane [13] and depends on whether the na-

notube is semiconducting or metallic [17]. Raman spectra showed the G band at 1582 cm^{-1} for pristine sample (Fig. 3a). After $1.6 \times 10^{17} \text{ electron/cm}^2$ fluence G peak was shifted to 1591 cm^{-1} and intensity was decreased (Fig. 3b). The asymmetry of the G peak (before and after electron irradiation) indicates that the given spectrum consists of G^+ and G^- bonds, where G^+ (corresponds to transverse vibrations of carbon atoms) is associated with charge transfer, and G^- (corresponds to longitudinal vibrations of carbon atoms) is due to metallic or semiconducting conductivity of a single-walled carbon nanotube.

One of the important results of this work is the shift in the wave number of the G mode from 1582 cm^{-1} in the initial state to 1591 cm^{-1} after irradiation with electrons. It is known that the value of 1582 cm^{-1} of the G mode corresponds to metallic conductivity [19], and its change to 1591 cm^{-1} may indicate the semiconducting nature of the conductivity [19].

The D band is a longitudinal optical phonon and is known as a disordered or defect (such as heteroatoms, vacancies, heptagon-pentagon pairs, kinks or even the presence of impurities, etc.) mode because a defect is required to elastically scatter in order for the process to conserve momentum [12]. The D band peaks were observed at the position 1331 cm^{-1} (Fig. 3a) and 1337 cm^{-1} (Fig. 3b) for pristine and post-irradiation accordingly. The D band intensity after electron irradiation clearly increased is shown was appeared radiation damages (Fig. 3a, 3b).

The G' band frequency is close to twice that of the D band and is found from 2500 to 2900 cm^{-1} . This is a second-order process from two zone boundary LO phonons. The G' band is an intrinsic property of the nanotube and graphite, and present even in defect-free nanotubes for which the D band is completely absent [14]. G' band peaks to appear at 2653 cm^{-1} and 2665 cm^{-1} for pristine and post irradiation accordingly.

The electron irradiation increased intensity ratio of I_D/I_G from 0.04 to 0.26 . The intensity ratio can directly serve as a measure of CNT structural quality, that is, the quality of the single-walled nanotube has deteriorated.

The nanocrystallite size of the SWCNT has enlarged [15] with the $1.54 \times 10^{17} \text{ electron/cm}^2$ fluence, respectively and can see that by using Scherrer equation (2).

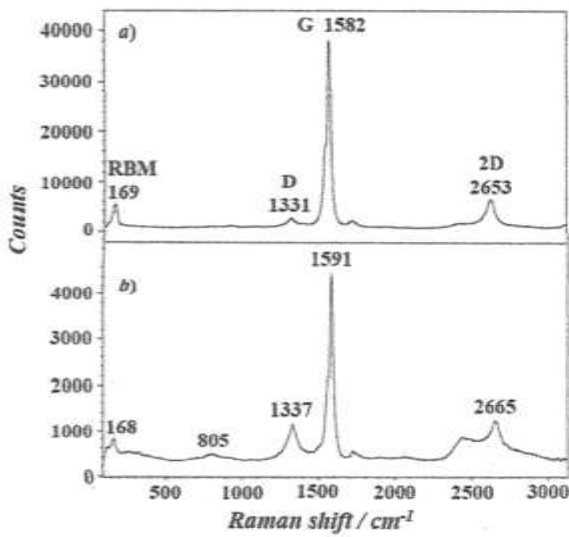


Figure 3. Raman spectra of SWCNT: a) pristine, b) at 1.6×10^{17} electron/cm² fluence.

$$D = \frac{k\lambda}{\beta_s \cos \theta} \quad (2)$$

Here, D is nanocrystallite size, which may be smaller or equal to the grain size; k is a dimensionless shape factor, has a typical value ~ 0.9 ; λ is the X-ray wavelength; β_s is the band width broadening at half the maximum intensity associated with microstrain, in radians, θ is the Bragg angle.

The formula (2) does not take into account the presence of microstrain in the samples; therefore, the dimensions of the coherent scattering regions in highly deformable samples are not suitable for calculations.

For this, there is the Stokes formula:

$$\beta_D = 4\epsilon \tan \theta, \quad (3)$$

here ϵ is the value of the relative strains of the crystal lattice.

Taking into account that irradiation with high energy electrons can lead to the appearance of microstrain in the sample, full width at half maximum (β) of the experimental peaks can be represented as the sum of the peak width due to microstrain (β_s) and the peak width associated with grain size (β_D), i.e.

$$\beta = \beta_s + \beta_D. \quad (4)$$

For this, we used the full width of the peaks at half maximum and the integral intensities of the reflections from 1 phase (200), (102), (103) and (222), from 2 phase (002) and (200).

$$D_{in} = 4.06 \text{ nm } (\epsilon = 8.42 \times 10^{-3})$$

$$D_{1.18} = 4.09 \text{ nm } (\epsilon = 8.11 \times 10^{-3})$$

$$D_{1.54} = 5.03 \text{ nm } (\epsilon = 7.62 \times 10^{-3})$$

Structure analysis of SWCNT showed the lattice parameters were enlarged, the reason for these changes were vacancies created by energetic electrons. This mechanism was invoked by [21, 22] and explain follow: the vacancies of SWCNT gave rise to surface reconstructions and diameter got larger because of appeared double vacancy (DV) transforms to an agglomeration of five- and eight-membered rings (Fig. 4).

Therefore carbon nanotubes can be called self-healing materials.

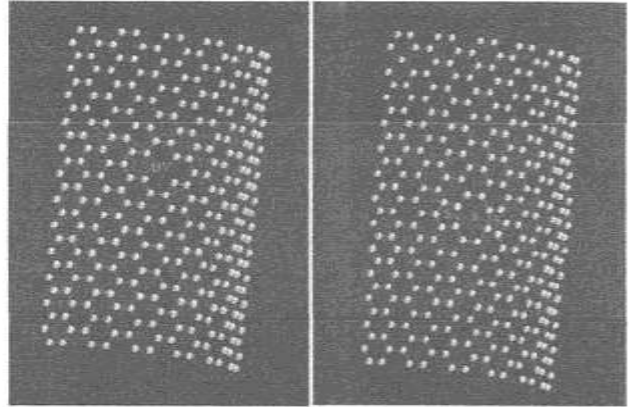


Figure 4. SWCNT defects reconstructions. Double vacancy (DV) transforms to an agglomeration of five- and eight-membered rings in C-C bonds.

Thus, irradiation of a single-walled carbon nanotube with electrons up to fluence of 1.54×10^{17} electron/cm² can be and stimulates the transition from metallic to semiconducting conductivity. It could be assumed that the increase in the intensity of the D-mode after electron irradiation is associated with an increase in the content of amorphous carbon. However, the width of the peak in Raman spectroscopy is less than $\sim 100 \text{ cm}^{-1}$, and also in the X-ray diffraction pattern at small scattering angles, there is no broad diffuse peak (halo) characteristic of amorphous carbon.

All this indicates that irradiation does not promote the formation of amorphous carbon in a SWCNT, but indicates the formation of other types of defects (breaking of the C-C bond).

IV. Conclusion

It was found that the initial sample of a single-walled carbon nanotube is two-phase with hexagonal phases with the space group $P6/mmm$ and $P6_3/mc$.

Irradiation with electrons up to a fluency of 1.54×10^{17} electron/cm² leads to an increase in the lattice parameter a and b from 4.7623 Å to 4.9378 Å and a decrease in the parameter c from 3.9491 Å to 3.9469 Å.

Radiation treatment with electrons fluency of 1.54×10^{17} electron/cm² leads to an increase in the size of nanocrystallites from 4.06 nm to 5.03 nm, as well as a decrease in microstrain with an increase in the electron fluence.

Irradiation of a SWCNT with electrons energy of 2 MeV to the fluence of 1.54×10^{17} electron/cm² does not contribute to an increase in the graphite content in the SWCNT.

The value of the diameter of the SWCNT $d = 1.42$ nm after electron irradiation with a fluence of 1.54×10^{17} electron/cm² indicates a weak effect of radiation on the initial nanotube diameter $d = 1.43$ nm. The (n, m) integers of nanotube was determined to be (18, 0) and (15, 5), pristine and post irradiation, respectively, and after irradiation the nanotube was transferred from the metal to the semiconductor state. This is also proved by the fact that the G mode frequency is shifted to the right.

A Raman spectrum was found at 805 cm⁻¹, which is due to the formation of defects induced by electron irradiation with a fluence of 1.54×10^{17} electron/cm².

It was found that electron irradiation leads to deterioration of the I_D/I_G quality of a single-walled carbon nanotube from 0.04 to 0.26. The C-C bonds after irradiation were decreased.

Acknowledgment. We would like to thank colleagues "Electronica U003" accelerator for help irradiating progress. Also we thank V.M. Rotshteyn to measure Raman spectroscopy.

This research was carried out under themes of Institute of Nuclear Physics of Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan "Radiation-stimulated processes in nuclear transmutation in alloyed silicon single crystals".

References

- [1] A. Aqel, Kh.M.M. Abou El-Nour, R.A.A. Ammar, A. Al-Warthan. *Arabian Journal of Chemistry* **5**, 1-23 (2012).
- [2] A. Eatemadi, H. Daraee, H. Karimkhanloo, M. Kouhi et al. *Nanoscale Research Letters* **9**, 393 (2014).
- [3] J. Maultzsch, H. Telg, S. Reich, and C. Thomsen, *Phys. Rev. B* **72**, 205438 (2005). A. Firstauthorname, B. Secondauthorname, and C. Thirdauthorname, Here Goes the Title of the Book (Publisher, City, year), p. 111.
- [4] A. Jorio, R. Saito, J.H. Hafner, C.M. Lieber, M. Hunter, T. McClure, G. Dresselhaus, and M.S. Dresselhaus. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1118 (2001).
- [5] J.H. Choi, J. Lee, S.M. Moon, Y.T. Kim, H. Park, Ch.Y. Lee. *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 4739-4743 (2016).
- [6] C. Kramberger, R. Pfeiffer, H. Kuzmany, V. Zolyomi, and J. Kürti. *Phys. Rev. B* **68**, 235404 (2003).
- [7] A.M. Rao, E. Richter, S. Bandow, B. Chase, P.C. Eklund, K.A. Williams, S. Fang, K.R. Subbaswamy, M. Menon, A. Thess, R.E. Smalley, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus. *Science* **275**, 187 (1997).
- [8] J. Kürti, G. Kresse, and H. Kuzmany, *Phys. Rev. B* **58**, R8869 (1998).
- [9] L. Henrard, E. Hernandez, P. Bernier, and A. Rubio, *Phys. Rev. B* **60**, R8521 (1999).
- [10] E.M. Dahl. Thesis submitted to the faculty of the Virginia Polytechnic Institute and State University in partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science, Blacksburg, VA (2013).
- [11] Y. Miyata, K. Mizuno, and H. Kataura. *Journal of Nanomaterials* **2011**, Article ID 786763, 7p. (2010).
- [12] A. Jorio, A.G. Souza Filho, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus, et al. *Materials Research Society* **706**, (2002).
- [13] R. Saito, A. Gruneis, Ge.G. Samsonidze, V.W. Brar, et al, *New Journal of Physics* **5**, 157.1-157.15 (2003).
- [14] I.I. Yuldashova, M.Y. Tashmetov. *Physica B: Condensed Matter* **571**, 280-284 (2019).
- [15] M.A. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Satio, and A. Jorio. *Phys. Rep.* **409**, 47-99 (2004).
- [16] R.R. Bacsa, A. Peigney, C. Laurent, P. Puech, and W.S. Bacsa. *Phys. Rev. B* **65**, 161404R (2002).
- [17] S. Costa, E. Borowiak-Palen, M. Kruszynska, A. Bachmatiuk, R.J. Kalenczuk, *Material Science-Poland* **26**, No.2 (2008).
- [18] J. Park, S.J. Shin and M.J. Seong, *Journal of the Korean Physical Society* **53**, No.4, 2312-2315 (2008).
- [19] A. Jorio et al, *New Journal of Physics* **5**, No.1, 139 (2003).
- [20] Ch.H. Kiang, W.A. Goddard, R. Beyers, and D.S. Bethune, *J. Phys. Chem.* **100**, 3749-3752 (1996).
- [21] A.V. Krashennnikov, K. Nordlund. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **216**, 355-366 (2004).
- [22] A.V. Krashennnikov and F. Banhart. *Nature Materials* **6**, No.10, 723-733 (2007).
- [23] Y. Maniwa et al. *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, L668 (1999).
- [24] A. Jorio and R. Saito. Raman spectroscopy for carbon nanotube applications. *Journal of Applied Physics* **129**, 021102 (2021).
- [25] [<http://www.photon.t.u-tokyo.ac.jp/~maruyama/kataura/chiraldata.html>]
- [26] C. Thomsen and S. Reich. Raman scattering in carbon nanotubes. *Top. Appl. Phys.* **108**, 115-232 (2007).

Юкори энергияли электронлар дастаси таъсири остидаги бир деворли углерод нанонайчалар структураси ва радиациявий нуқсонлар

М.Ю. Ташметов, И.И. Юлдашева

Ўзбекистон республикаси Фанлар академияси Ядро физикаси институти, Мирзо-Улугбек тумани, Улугбек қўргони, Хуросон кўчаси 1-уй, 100214, Тошкент, Ўзбекистон

Бир деворли углерод нанонайчалар (БДУНН) структура параметрларига, нанокристаллитлар ўлчамига, микроучланишига ва комбинацион сочилиш спектрларига 1.54×10^{17} электрон/см² флюенсгача электронлар билан нурлантиришнинг таъсири тадқиқ қилинди. Электронлар билан нурлантириш панжара параметрларининг *a* ва *b* йўналишларда 4.7623 дан 4.9378 Å гача ортишига ва *c* ўқ бўйича 3.9491 дан 3.9469 Å гача олиб келди. Электрон билан нурлантириш бир деворли углерод нанонайчаларда нуқсонлар ҳосил бўлиши туфайли нанокристаллитлар ўлчамини 4.06 нм дан 5.03 нм гача ўсишига ва комбинацион сочилиш спектрларини юкори частота томонга силжишига олиб келди ҳамда 805 см⁻¹ спектри ҳосил бўлишини кўрсатди.

Калит сўзлар: бир деворли углерод нанонайчалар, электронлар дастаси, Раман спектроскопияси, рентген структуравий таҳлил, катак параметрлари.

The influence of size on the photoluminescence properties of ZnO nanostructures

R.R. Jalolov^{*1}, B.N. Rustamova¹, Sh.Z. Urolov¹, Z.Sh. Shaymardanov^{1,2}

¹ Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Uzbek Academy of Sciences, Durmon yuli str. 33, 100125, Tashkent, Uzbekistan

² National University of Uzbekistan, University str.4, 100174, Tashkent, Uzbekistan

Received: 14.09.2021

* Corresponding author: e-mail rr_jalolov@iplt.uz, Phone: +998 97 427 27 71

В данной работе описаны методы синтеза различных наноструктур ZnO в водных растворах при низких температурах и исследуется влияние размера синтезированных образцов на спектры фотолюминесценции (ФЛ). По мере увеличения диаметра наноструктур наблюдалось уменьшение отношения интенсивности полосы ультрафиолетового излучения к интенсивности полосы желтого излучения в спектре ФЛ. Было обнаружено, что изменение диаметра наноструктур от 15 нм до 1000 нм приводит к уменьшению их ширины запрещенной зоны (E_g) от 3.28 до 3.21 эВ. В наноструктурах с диаметром менее ~400 нм, было обнаружено, что энергия запрещенной зоны сильно зависит от размера наноструктуры и что связи слабее, когда размер наноструктур превышал 400 нм.

Ключевые слова: наноструктуры ZnO, фотолюминесценция, дефекты, размерный эффект.

This paper describes methods for synthesizing different nanostructures of ZnO in aqueous solutions at low temperatures and examines the effect of the size of the synthesized samples on the photoluminescence (PL) spectra. As the diameters of the nanostructures increased, a decrease in the ratio of the intensity of the ultraviolet radiation band to the intensity of the yellow radiation band in the PL spectrum observed. It is found that changing the diameters of nanostructures from 15 nm to 1000 nm leads to a decrease in their bandgap energy (E_g) from 3.28 to 3.21 eV. When the diameters of the nanostructures were less than ~400 nm, it was found that the energy of the band gap was strongly depend on the size of the nanostructure, and that the bond was weaker as the size of the nanostructures exceeded 400 nm.

Keywords: ZnO nanostructures, photoluminescence, defects, scale effect

<https://doi.org/10.52304/ujp.2312.238>

1. Introduction

ZnO is a widely studied metal oxide semiconductor, due to its high transparency in the visible region, large bandgap, non-toxic nature, high exciton binding energy and abundant availability in nature makes it a potential candidate for a variety of applications such as gas sensors, transparent electrodes in solar cells, photocatalysts, nanolasers, photoluminescent devices, organic light-emitting diodes, thin-film transistors and et al. [1, 2]. A wide bandgap (3.37 eV at room temperature) makes ZnO a

promising material for photonic applications in the UV and blue spectral range, while the high exciton-binding energy (60 meV) allows efficient excitonic emission even at room temperature [1]. Also, ZnO is biocompatible which makes it suitable for biomedical applications. In addition, ZnO is a chemically stable and environmentally friendly material. Consequently, there is considerable interest in studying ZnO in the form of powders, single crystals, thin films, nanorods and nanocrystals. A low-temperature aqueous solution approach offers the potential for a much-lowered

fabrication cost and scale-up production because it can eliminate the complicated issues associated with high-temperature manufacturing and vacuum processing. Moreover, the typical growth temperatures are below 100°C, allowing the fabrication even on substrates such as plastic, which are not allowed to be exposed at higher temperatures.

Typically, a photoluminescence (PL) spectrum of ZnO nanostructures consists of two parts: a near band edge (NBE) emission centered at around 380 nm and defect-related emission bands in the visible range [1]. The PL characteristics of ZnO nanostructures strongly depend on their crystalline quality, which in turn are determined by their size and growing conditions and methods and post-grown treatment history. The defect-related emission bands can appear in violet-blue (390–460 nm) or/and green (500–520 nm) or/and yellow-orange (560–600 nm) or/and red (650 nm) ranges. The interstitial oxygen or complexes formed with oxygen have been ascribed to yellow-orange band [3–7]. Yellow-orange band is frequently observed in ZnO nanostructures grown from water-contained solutions of Zn compounds at relatively low temperatures. The most obvious trend versus particle size is that the surface-to-volume ratio increases for smaller particles and the transport distance from any interior point to surface traps and recombination sites decrease in the same trend. In addition to the correlations between the defects and the optical properties, one should also notice that at the nanoscale the size not only directly impacts the defect contents but also the optical properties of materials. Examining PL spectra of various ZnO nanostructures provide a way for us to understand the roles of size and defects in the earlier photoexcited processes. Despite the large body of research devoted to size effect in ZnO nanostructures, many questions remain regarding the optical and electronic properties of these centres. The size of nanostructures has a major impact on their optical, crystalline, and electrical properties. There are many contradictions in published scientific articles. Sharma et al. [8] noted that when thickness of the film increases, crystalline quality of ZnO thin films improves, in contrast to Ref [9, 10] as the size of the nanostructures increased, their optical quality decreased.

This work reports a systematic study of dependence of the morphological and optical properties of various ZnO nanostructures grown over glass substrates. We have synthesized different 1D ZnO nanorods using a low-temperature hydrothermal method and ZnO nanocrystals using a chemical bath

deposition method. The relationships between size of ZnO nanostructures and PL properties are revealed and discussed. Our studies show that as the size of ZnO nanostructures synthesized in aqueous solution at low temperatures increased, the number of defects formed in them increased and the maximum redshift of the PL intensity occurred.

II. Experiment

ZnO nanorods have been synthesized through hydrothermal route. Before ZnO nanorods are grown, a seed layer was formed on the surface of the substrates. Dip coating method has been applied to prepare ZnO seed layer on substrates because of its low cost and easy approach. All the reagents (Sigma-Aldrich, 99%) used in the experiment were analytically pure and were used without further purification. 5 mM of zinc acetate dehydrate ($\text{ZnC}_4\text{H}_6\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) was dissolved into 40 ml of ethanol with stirring for 1 hour at room temperature for obtaining a clear homogenous solution. The stirred solution was taken in a beaker and the substrates were dipped in the solution with different velocities using a handmade automatic dip coating system and dried in air at room temperature. The substrates with zinc acetate seed layer were annealed at 200°C for 30 min in air to decompose zinc acetate into ZnO nanocrystals.

Growth of ZnO nanorods is carried out in the following order: the aqueous solutions of zinc nitrate hexahydrate ($\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) and hexamethylenetetramine ($\text{C}_6\text{H}_{12}\text{N}_4$) were first prepared separately and then they were mixed together. The resulting suspension was transferred into a Teflon-lined stainless steel autoclave. The substrates with the ZnO seed layer were placed face-down and without seed layer substrates were placed on the bottom of the autoclave. Finally, the autoclave was sealed and put into the water thermostat bath. The hydrothermal reaction was carried out at 90°C for 5 hours.

ZnO nanocrystals were synthesized by chemical bath deposition method. The growth procedure was designed as follows: 0.6586g zinc acetate dihydrate ($\text{Zn}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) was dissolved in a 30 ml methanol solution under vigorous stirring at room temperature (RT), then ultra-sonicated for 10 min. DI water (10 ml) was added into the solution under stirring. Glass substrates were placed in a row in the bottom of the conical flask with the prepared solution. The conical flask then was put into a water tank at a constant temperature of 63°C for 24 h. After the experi-

ration of the ZnO particle deposition process, the conical flask was taken out and cooled to RT.

The emission spectra of ZnO nanorods were obtained using a photoluminescence set-up coupled to a 0.75 m monochromator with diffraction grating and high sensitive photomultiplier tubes. As excitation source, a longitudinally pumped nanosecond pulse N_2 laser emitting at 337 nm (pulse duration ~ 6 ns, $P \sim 15$ kW, repetition rate 100 Hz) was used. Emission spectra were recorded using a boxcar integrator with a gate width of 40 ns.

The morphology of the ZnO nanostructures was examined using a scanning electron microscope (SEM) PHILIPS XL-30.

III. Results and discussion

Morphology and particle size of the synthesized ZnO nanostructures are shown in Fig. 1. Crystallized the seed particles of ZnO deposited on substrates have a similar shape with an average size of 10–20 nm as shown in Fig. 1a.

Figure 1b displays SEM images of the as-grown ZnO nanorods grown on the substrate with seed layer. As can be seen, the hydrothermal growth method provided to synthesis a high density of uniform hexagonal nanorods approximately 50–70 nm in diameter and the length around 0.9–1.1 μm . Simultaneously with the vertically aligned ZnO nanorod grown on the seed layer, homogeneous nanostructures of ZnO were also deposited on glass substrate placed on the bottom of the autoclave.

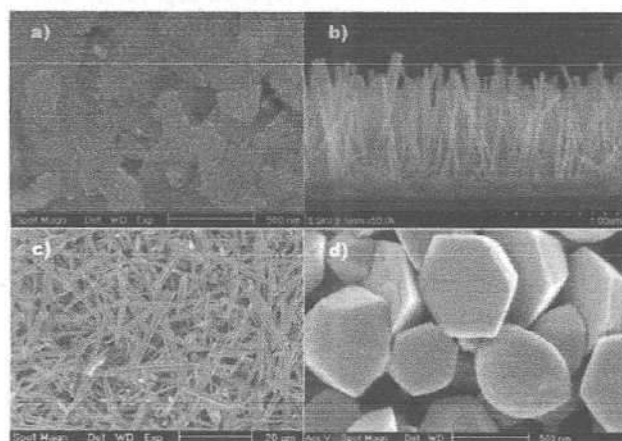


Figure 1. SEM images of ZnO nanostructures obtained by scanning electron microscope: a) crystallized the seed particles, b) nanorods, c) microrods, d) nanocrystals.

These ZnO microrods possesses spindle-shaped and hexagonal form and their length and diameter are

18–20 and 0.5–1 μm , respectively. Microrods are located chaotically and have predominantly horizontal positions on the substrate. The ZnO nanocrystals deposited on quartz substrates have the same regular cone form with the average sizes of 300–500 nm as shown in Fig. 1d.

Fig. 2 shows the decomposition of PL spectra of as-grown ZnO nanostructures grown by aqueous solution methods at low temperatures into Gaussian components. The PL spectrum of crystallized the seed particles contains only a strong band in the ultraviolet range and no emission bands in the visible range were observed. However, PL spectra of ZnO nanostructures except only seed particles consist of two peaks: narrow and strong in the UV range with weak and broad emission bands in the visible range

The deconvolution of PL spectra into Gaussian components helps to obtain more complete information about the radiation bands in the spectrum. The Gaussian deconvolution shows that The PL spectra contain a sharp ultraviolet (UV) peak located at 378–386 nm and weak violet band (VB) 391–402 nm and a broad yellow emission band (YB) around 558–568 nm [11]. The UV peak was attributed to near band edge emission or free exciton of ZnO. The yellow and blue luminescence bands can be attributed to intrinsic defects and/or their complexes, considering that ZnO nanostructures were synthesized without extraneous additions. At the hydrothermal synthesis method, the reaction runs in an aqueous medium with excess oxygen, which facilitates the formation of zinc vacancies. Theoretical studies predict that under ZnO-synthesis conditions with excess oxygen the zinc-vacancy and interstitial oxygen formation enthalpy is smaller than that for other defects [12]; therefore, zinc vacancies can be dominant defects. Taking into account these data and our results, we can suggest that the violet PL band near 395–405 nm in ZnO nanostructures is also due to defects related to zinc vacancies or their complexes. As was theoretically predicted, the $(0/-1)$ transition level for a zinc vacancy lies above the top of the valence band by ~ 0.45 [12] or ~ 0.3 eV [13] and the $(-1/-2)$ transition level lies above the top of the valence band by ~ 0.8 [12] or 0.7 eV [13]. Hence, electron transitions from the conduction band or a shallow donor level to a singly charged acceptor level of a zinc vacancy can provide luminescence with a wavelength of 395–450 nm [14].

The yellow band is often observed in zinc oxide nanomaterials grown from aqueous solutions at

relatively low temperatures and is usually attributed to interstitial oxygen or complexes formed with the participation of oxygen. A ratio of the intensity of the ultraviolet emission to the intensity of the broadband emission indicates an optical quality of nanostructures. It is remarkable in Fig. 2 that the ratio of the intensity of the ultraviolet emission to the intensity of the broadband (visible) of PL emission bands depends significantly on the size of the nanostructures. As the diameters of the nanostructures increased from 70 nm to 1000 nm,

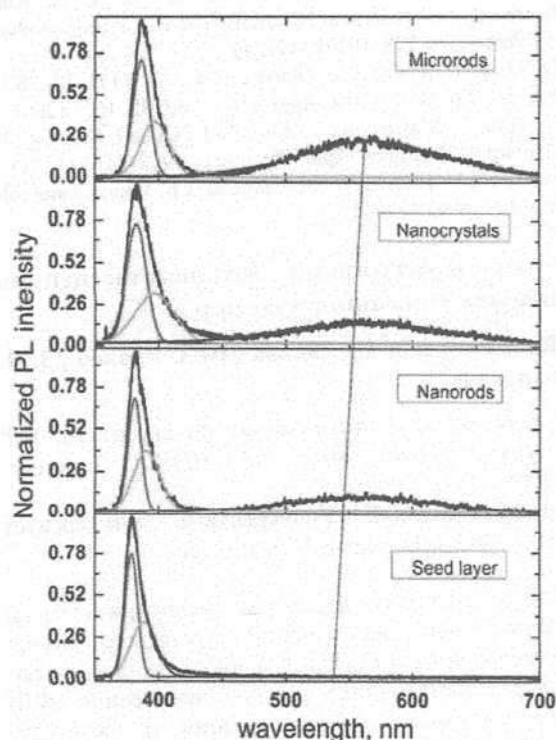


Figure 2. PL spectra of ZnO nanostructures and their Gaussian components.

the ratio of the intensity of the ultraviolet radiation band to the intensity of the yellow radiation band decreased from 7.5 to 3.2. This indicates that the size of the as-grown nanostructures increases, the concentration of defects in them increases and their quality deteriorates [9, 10]. According to the authors in Ref. [15], the yellow luminescence from ZnO structures was not sensitive to the surface modifications of the nanostructures and could be originated from the defects localized in the bulk, not on the surface. Thus, changes in the surface-to-volume ratio of ZnO nanostructures should affect the violet and yellow luminescence intensities in opposite directions. The

surface-to-volume ratio N can be expressed as:

$$N = \frac{S}{V}$$

For the a) crystallized seed particles, b) – nanorods c) – nanocrystals d) – microrods, the surface-to-volume ratio is ~ 200 , ~ 30 , ~ 11 , ~ 6 . Obviously, the crystallized seed particles have more advanced surface but small volume than that the other nanostructures and the yellow luminescence band will dominate in the PL spectrum ascribed from the randomly deposited ZnO microrods.

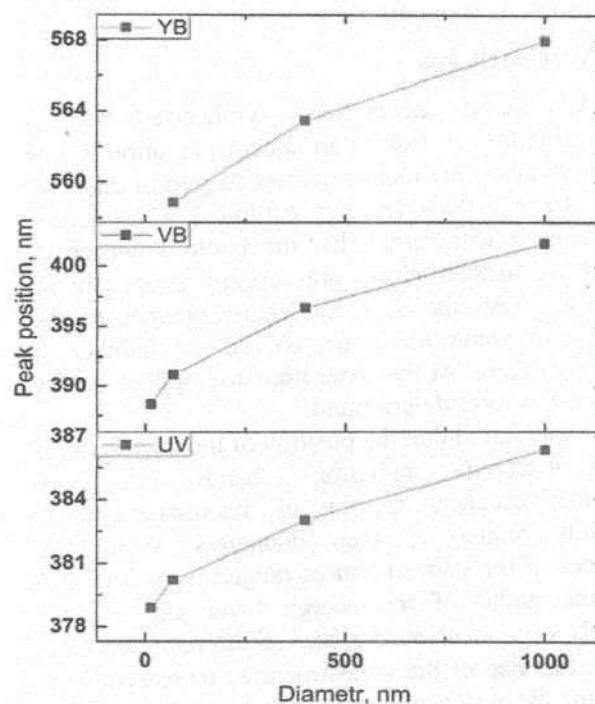


Figure 3. Variation of the maximum of the emission bands depending on the size of ZnO nanostructures.

Fig. 3 shows the variation of the maximum of the emission bands depending on the size of the nanostructures. Maxima of the UV emission peak belong to the near band edge transition level shifted from 378 to 386 nm. This result indicates that when the size of the structure increases from 15 to 1000 nm, the values of bandgap energy (E_g) decreased from 3.28 to 3.21 eV. According to the bandgap energy (E_g) of the bulk ZnO, these results can be attributed to the optical confinement effect correspond to the size and length of nanostructures [16, 17]. This results show that as the size of the nanostructures increases, the maxima of all emission peaks also move toward larger wavelengths at the same time.

The fact that the shifts of the maximums of all the emission bands occur under the same law also confirms that the values of bandgap energy is shrinking.

The position of the maximum of the emission peaks varies inversely with the size of the nanostructures (Fig. 3). When the size of the nanostructures ranged from 0 to 400 nm, the width of the energy band gap became strongly dependent on the size of the nanostructure, and as the size of the nanostructures increased from 400 nm, the width of the energy band gap became weakly dependent on the size of the nanostructures.

IV. Conclusion

We have successfully synthesized various nanostructures of ZnO in an aqueous solution at low temperatures. ZnO nanostructures ranged in diameter from 15 to 1000 nm and exhibited a hexagonal structure. It was found that the photoluminescence spectra of nanostructures are strongly dependent on their size. As the ratio of nanostructures to the volume of water increased, so did the number of defects in them. At the same time, the optical quality of nanostructures deteriorated.

It was found that the position of the maximum of the observed radiation bands in the photoluminescence spectra of nanostructures is inversely related to their diameters. When the diameter of the nanostructures ranged from 0 to 400 nm, the width of the energy band gap became strongly dependent on the size of the nanostructure, and as the size of the nanostructures increased from 400 nm, the width of the energy band gap became weakly dependent on the size of the nanostructures. The maximums of all the emission bands occur under the same law.

References

- [1] U. Ozgur, Y.I. Alivov, C. Liu, et al. *J. Apl Phys.* **98**(4), 041301 (2005).
- [2] X. Sheng and Z.L. Wang. *Nano Res.* **4**(11), 1013-1098 (2011).
- [3] C. Klingshirn, R. Hauschild, J. Fallert, and H. Kalt. *Phys. Rev. B* **75**, 115203 (2007).
- [4] C. Couteau, A. Larrue, C. Wilhelm, and C. Soci. *Nanophotonics* **4**, 90 (2015).
- [5] O. Svelto. *Principles of lasers* (4-th edition) (Springer New York, Dordrecht, Heidelberg, London, 2010).
- [6] S.S. Kurbanov, H.D. Cho and T.W. Kang. *Optics Commun.* **284**, 240 (2011).
- [7] A.-S. Gadallah, K. Nomenyo, C. Couteau, D.J. Rogers and G. Léronel. *Appl. Phys. Lett.* **102**, 171105 (2013).
- [8] S. Sharma, C. Periasamy, and P. Chakrabarti. *Electron. Mater. Lett.* **11**, No.6, 1093-1101 (2015).
- [9] G. Xiong, U. Pal, and J.S. Garcia. *Journal of Applied Physics* **101**, 024317 (2007).
- [10] I. Musa, N. Qamhieh, S.T. Mahmoud. *Results in Physics* **7**, 3552-3556 (2017).
- [11] Sh.Z. Urolov, R.R. Jalolov, Z.Sh. Shaymardanov et al. *Optics and Spectroscopy* **127**, No.6, 1093-1097 (2019).
- [12] A.F. Kohan, G. Ceder, D. Morgan, and C.G. van de Walle, *Phys. Rev. B* **61**, 15019 (2000).
- [13] P. Erhart, A. Klein, K. Albe. *Physical Review B* **72**, 085213 (2005).
- [14] R.R. Jalolov, Sh.Z. Urolov, Z.Sh. Shaymardanov, S.S. Kurbanov, B.N. Rustamova. *Materials Science in Semiconductor Processing* **128**, 105783 (2021).
- [15] D. Li, Y.H. Leung, A.B. Djurišić, Z.T. Liu, M.H. Xie, S.L. Shi, S.J. Xu, W.K. Chan. *Appl. Phys. Lett.* **85**, 1601 (2004).
- [16] I. Musa, F. Massuyeau, L. Cario, J.L. Duvail, S. Jobic, P. Deniard, E. Faulques. *Appl. Phys. Lett.* **99**, 243107 (2011).
- [17] K.L. Foo, U. Hashim, K. Muhammad, Ch. Voon. *Nanoscale Res. Lett.* **9**:429 (2014).

ZnO наноструктурининг фотолюминесценция хоссаларига ўлчамнинг таъсири

Р.Р. Жалолов¹, Б.Н. Рустамова¹, Ш.З. Уролов¹, З.Ш. Шаймарданов^{1,2}

¹Ион-плазма ва лазер технологиялари институти, ЎЗР ФА, Дўрмон йўли кўчаси, 33, 100125, Тошкент, Ўзбекистон

²Ўзбекистон Миллий Университети, Университет кўчаси 4, 100174, Тошкент, Ўзбекистон

Ушбу ишда паст хароратда сувли эритмаларда ZnO нинг турли хил наноструктураларини синтез қилиш усуллари баён қилинган бўлиб, синтез қилинган намуналар ўлчамларининг фотолюминесценция (ФЛ) спектрларига таъсири тадқиқ қилинган. Наноструктураларнинг диаметрлари ошиб бориши билан ФЛ спектридаги ултрабинафша нурланиш полосаси интенсивлигининг сариқ нурланиш полосаси интенсивлигига нисбати камайиши кузатилди. Наноструктураларнинг диаметрлари 15 нм дан 1000 нм гача ўзгариши уларнинг таққиланган зона энергиясининг (E_g) 3,28 эВ дан 3,21 эВ гача камайишига олиб келиши аниқланди. Наноструктураларнинг диаметрлари ~400 нм дан кичик бўлганида, таққиланган зона энергияси наноструктуранинг ўлчамига кучли боғлиқ эканлиги, ноструктуралар ўлчами 400 нм дан катталашган сари бу боғланиш кучсиз эканлиги аниқланди.

Калит сўзлар: ZnO наноструктуралари, фотолюминесценция, нуқсонлар, ўлчам эффекти.

Experimental study of the efficiency of a multi-pass pumping scheme for solar lasers

A.A. Sherniyozov*, Sh.D. Payziyev, F.A. Shermatova, Sh.A. Begimkulov, A.G. Qahhorov, F.M. Kamoliddinov, A.G. Aliboyev

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies, Uzbek Academy of Sciences, Durmon yuli st. 33, 100125, Tashkent, Uzbekistan

Received 27.08.2021

* Corresponding author: anvar.sherniyozov@gmail.com, Phone: +998 977 221 904

Приведены результаты исследования целесообразности многопроходной схемы накачки в лазерах с солнечной накачкой. Разработан вторичный концентратор, способствующий многократному прохождению солнечных фотонов через активную среду. При использовании многопроходной схемы накачки наблюдается увеличение на 12.5% спектров люминесценции Nd:YAG в окрестности линии генерации на длине волны 1064 нм.

Ключевые слова: Лазеры с солнечной накачкой, многопроходная схема накачки, Nd:YAG, вторичный концентратор.

Here we present the results of our study on the feasibility of a multi-pass pumping scheme in solar lasers. A secondary concentrator has been developed to ensure the multiple passage of solar photons through the active medium. When using a multi-pass pumping scheme, an increase of 12.5% in the luminescence spectra of Nd:YAG is observed in the vicinity of the laser line at a wavelength of 1064 nm.

Keywords: Solar lasers, multi-pass pumping scheme, Nd:YAG, secondary concentrator.

<https://doi.org/10.52304/ujp23i2.239>

I. Introduction

It is obvious that one of the many factors influencing laser performance is the pumping scheme, regardless of the type of optical laser. Since the first realization of the celebrated Ruby laser using a flash-tube, diverse types of pumping methods and schemes are being used. Laser engineering requires important considerations for pumping schemes such as stability, efficiency, and convenience.

Pumping efficiency is more critical in solar pumped lasers. Because, firstly, solar lasers usually use a primary concentrator for focusing solar radiation, meaning concentrated radiation energy. Secondly, the solar spectrum is very wide in comparison with absorption spectra of the currently existing active media. There are mainly three categories of

pumping schemes in solar lasers: end-pumping [1, 2], side-pumping [3, 4] and end-side pumping schemes. Obviously, each has advantages and disadvantages in a particular circumstance. A noteworthy advantage of the end-pumping (or combined end-side pumping) is a relative longevity of optical path length inside an active medium ensuring efficient absorption of solar photons. However, when end-pumping scheme is used, the possibility of solving scaling up problems is severely limited [3], in addition, control of the cavity layout becomes more difficult. These two are essential features required to generate powerful, high-quality beams. The indicated problems of end-pumping easily attainable in side-pumping schemes due to the lower pump efficiency due to the small value of the optical path inside the

active medium. However, this leads to low efficiency when using a side-pumped scheme. However, the latter leads to a low conversion efficiency of lasers using a side-pumped scheme.

Recently, we proposed a way to mitigate the lower pump efficiency problem in the side-pumping scheme where the effectiveness of multi-pass scheme is demonstrated using a simulation model based on Monte-Carlo photon tracing method [5]. In this paper, our aim is to experimentally study the feasibility of a multi-pass pumping scheme under solar illumination using a Fresnel lens. In next section, we briefly describe the experimental setup.

II. Experimental setup

We developed a new chamber with a retro-reflector [6, 7] for side pumping. Figure 1 shows a photo of the developed camera for multi-pass transverse pumping. The camera was made of aluminium and the interior surfaces were polished and silver coated. The internal dimensions of the camera are 14mm×30mm×35mm.

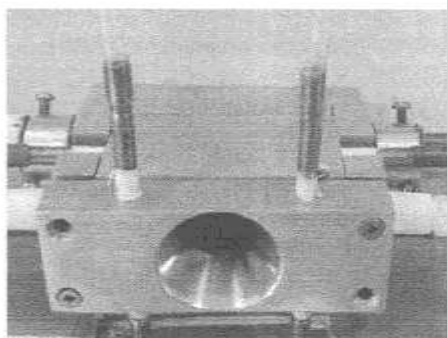


Figure 1. Chamber for multi-pass side pumping.

Concentrators based on a Fresnel lens [8], in contrast to parabolic solar concentrators, have a more smeared spot with a relatively large diameter with the same dimensions of the Fresnel lens due to dispersion in the material from which the lens is made. In this regard, to reduce losses at the chamber inlet, we designed a secondary concentrator with a cone shape. The reverse side was coated with silver and served as a retro reflector providing multi-pass pumping. The reflection coefficient of the inner walls of the pump chamber as well as of the retro-reflector was about 90%. Using this camera, the experimental setup shown in Figure 2 was developed.

To measure the luminescence spectrum, an ASP-150T spectrometer is used, which allows measurements in the spectral range 170–1100 nm, which

covers the luminescence spectra of Nd:YAG. As a source of excitation, we used solar radiation concentrated by a small Fresnel lens with dimensions of 18×24 cm² with a focal length of about 30 cm and a transmission of ~75%. The power at the focus of the solar concentrator could reach up to 30 W with solar radiation intensity of 950 W·m⁻², and the focal spot diameter was ~5 mm. In the experiments, the active element was cooled with distilled water to prevent unwanted thermal effects.

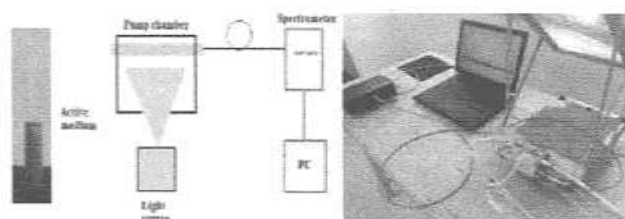


Figure 2. Block diagram of the experimental setup and a real image of the active medium.

III. Results and discussions

The experimental setup was used to measure the luminescence spectra of the Nd:YAG laser medium under excitation with concentrated solar radiation in turn with and without the use of a retro-reflector (front wall of the chamber with a conical secondary concentrator, see Fig. 1) and compared the results. Based on these comparisons, the effect of enhancement of Nd: YAG luminescence due to the process of multi-pass transverse pumping was estimated.

The following figures (Figs 3 and 4) show the obtained luminescence spectra of Nd: YAG in the vicinity of the 1064 nm lasing line. As can be seen from these spectra, when using a retro reflector (the front wall of a chamber with a conical secondary concentrator), an increase in luminescence is observed in comparison with the spectrum obtained in the absence of a retro reflector. Calculation of the line area ratios in the wavelength range of 1050–1080 nm for cases with and without a retro reflector showed that it was 1.125, that is, an increase of 12.5% is observed when using a retro reflector, which confirms our idea of multi-pass pumping to increase the efficiency of lasers with solar pumping. As for the not very large magnitude of the amplification effect, this can be explained by the not sufficiently high reflection coefficient of the pump chamber walls, which was about 90%. An increase in the reflection coefficient to 97–98%, we assume, may al-

low further improvement in the results of measuring this amplification effect.

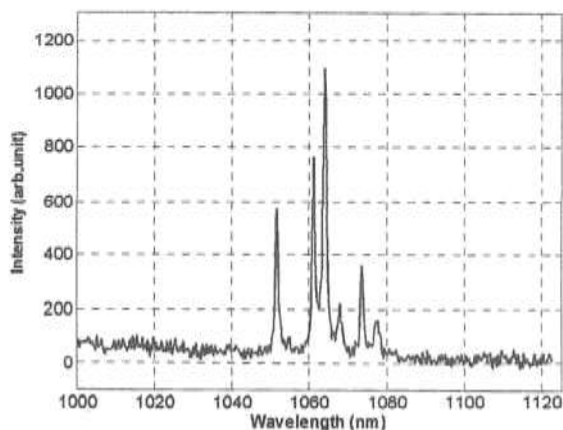


Figure 3. Nd:YAG luminescence spectrum in a scheme without a retro reflector.

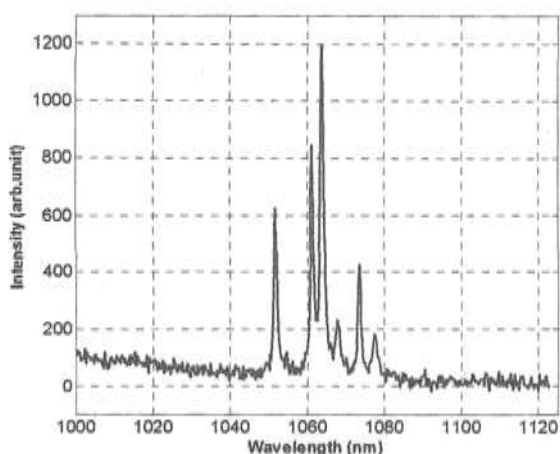


Figure 4. Nd:YAG luminescence spectrum in the scheme with a retro reflector.

IV. Conclusion

A new multi-pass pumping camera – a laser head for transversely pumped solar lasers has been developed and created. An experimental study of the luminescence spectra of Nd:YAG under excitation by concentrated solar radiation has been carried out. Application of a multi-pass pumping scheme enables an increase of 12.5% in the luminescence spectra of Nd:YAG is observed in the vicinity of the lasing line at a wavelength of 1064 nm when the reflection coefficient of the inner walls of the pump chamber is about 90% confirming the practicality of the proposed scheme in solar lasers

References

- [1] J. Almeida, D. Liang, and E. Guillot. Improvement in solar-pumped Nd:YAG laser beam brightness. *Optics & Laser Technology* 44, No.7, 2115-2119 (2012).
- [2] Ohkubo, Tomomasa, Takashi Yabe, Kunio Yoshida, Shigeaki Uchida, Takayuki Funatsu, Behgol Bagheri, Takehiro Oishi et al. Solar-pumped 80 W laser irradiated by a Fresnel lens. *Optics letters* 34, No.2, 175-177 (2009).
- [3] A.A. Sherniyozov, Sh.D. Payziyev. Solar pumped lasers: high-efficiency multi-pass side pumping scheme with Fresnel lens. *Appl. Sol. Energy* 56, 458-465 (2020). <https://doi.org/10.3103/S0003701X20060092>
- [4] A.A. Sherniyozov, M.Z. Ismailov, G.A. Khalikov, Sh.D. Payziyev. An efficient solar-pumped Ce:Nd:YAG laser with Fresnel lens. *Uzbek Journal of Physics* 21, No.6, 370 (2019).
- [5] Sh. Payziyev, Kh. Makhmudov, and Yasser A. Abdel-Hadi. Simulation of a new solar Ce:Nd:YAG laser system. *Optik* 156, 891 (2018).
- [6] A. Sherniyozov, Sh. Payziyev, G. Khalikov, K. Zikrillayev, S. Bakhramov, K. Makhmudov, M. Ismailov, D. Payziyeva. Effect of color converters on the performance of solar or light-emitting diode pumped solid-state lasers. *Uzbek Journal of Physics* 22(5), 287-290 (2020). <https://doi.org/10.52304/v22i5.193>
- [7] S.A. Bakhramov, A.A. Sherniyozov, Sh. D. Payziyev, Kh.F. Zikrillayev, G.A. Khalikov, Kh.M. Makhmudov, M.Z. Ismailov, D.E. Payziyeva, and T.G. Khotchenkova. Feasibility of luminophores in solar-pumped laser heads. *Journal of Applied Spectroscopy* 88, no. 2 (2021): 370-372.
- [8] A. Sherniyozov and Sh. Payziyev, Focal spot structure of Fresnel lens and its homogenization. *Uzbek Journal of Physics* 21, No.4, 245 (2019).

Куёш лазерлари учун кўп-ўтишли оптик дамлаш схемаси эффективлигини экспериментал ўрганиш

А.А. Шерниёзов, Ш.Д. Пайзиев, Ф.А. Шерматова, Ш.А. Бегимкулов, А.Г. Каххоров, Ф.М. Камолитдинов, А.Г. Алибоев

Ион-плазма ва лазер технологиялари институти, Дўрмон йўли кўчаси 33, 100125, Тошкент, Ўзбекистон

Куёш лазерларида кўп-ўтишли дамлаш схемасини қўллаш мақсадга мувофиқлиги бўйича ўтказилган тадқиқот натижалари келтирилган. Куёшдан келаётган фотонларнинг фаол муҳит орқали кўп марта ўтиш имконини яратиб берувчи иккиламчи концентратор ишлаб чиқилди. Кўп ўтишли дамлаш схемасидан фойдаланилганда, тўлқин узунлиги 1064 нм бўлган генерация чизиғи яқинида Nd:YAG люминесценция спектрининг 12.5% га ошиши кузатилди.

Калит сўзлар: Куёш лазерлари, кўп-ўтишли дамлаш схемаси, Nd:YAG, иккиламчи концентратор.

Особенности размерно-фононного поглощения света в цилиндрических проволоках

Б.Э. Эшпулатов*, Д.Ш. Хужанова, А.Ш. Хужанов

Самаркандский филиал Ташкентского университета информационных технологий им. Мухаммеда аль-Хорезми, ул. Ш. Мирзо, 47А, 100140, Самарканд, Узбекистан

Получена 09.09.2021

* Corresponding author: e-mail barat50@bk.ru, +998 91 548 23 99

Развита теория формы линии размерно-фононного поглощения света в размерно-квантованной полупроводниковой проволоке цилиндрической формы. Получены волновые функции и энергетический спектр электрона. На основе этих волновых функций определен матричный элемент оператора Фурье разложения фонона и получен гамильтониан взаимодействия электрона с объемными оптическими фононами. Для оценки членов ряда теории возмущений использована стандартная графическая техника. Показано, что размерно-фононное поглощение содержит квадратичную логарифмическую сингулярность. Получены частотные зависимости резонансного размерно-фононного поглощения, когда переход между уровнями сопровождается испусканием оптического фонона. Определены спектры электрон-фононной системы в случае резонансной связи между соседними уровнями. Показано, что резонансное размерно-фононное поглощение расщепляется на два компонента, расстояние между которыми существенно больше, чем в объемном случае.

Ключевые слова: форма линий, размерно-фононное поглощение, межуровневые частотные зависимости, спектры, электрон-фононная система, расщепление линий.

The theory of the shape of the line of size-phonon absorption of light in a size-quantized cylindrical semiconductor wire is developed. The wave functions and the energy spectrum of the electron are obtained. On the basis of these wave functions, the matrix element of the Fourier operator of the phonon expansion is determined, and the Hamiltonian of the interaction of an electron with bulk optical phonons is obtained. To estimate the terms of the perturbation theory series, a standard graphic technique is used. It is shown that the size-phonon absorption contains a quadratic logarithmic singularity. The frequency dependences of the resonant size-phonon absorption are obtained, when the transition between the levels is accompanied by the emission of an optical phonon. The spectra of the electron-phonon system are determined in the case of resonance coupling between adjacent levels. It is shown that the resonant size-phonon absorption splits into two components, the distance between which is much greater than in the bulk case.

Keywords: line shape, size-phonon absorption, frequency dependences between levels, spectra, electron-phonon system, line splitting.

<https://doi.org/10.52304/ujp.23i2.240>

I. Введение

Более 50 лет назад началось изучение квантовых эффектов в полупроводниковых структурах

- [1]. Были сделаны замечательные открытия в области физики низкоразмерного электронного газа
- [2], достигнуты поразительные успехи в техноло-

гии [3], построены новые электронные [4] и опто-электронные [5] приборы. Сегодня в физических лабораториях активно продолжаются работы, направленные на создание и исследование новых квантовых структур и приборов. Эти квантовые структуры и приборы станут элементами больших интегральных схем, способных с высокой скоростью переработать и хранить огромные объемы информации [4]. Возможно, что уже через несколько лет наступит эра квантовой полупроводниковой электроники.

Оптические и магнетооптические исследования низкоразмерных структур (квантовые ямы, нитки и точки) в настоящее время интенсивно развиваются [6-11].

Как отмечалось в литературе [7, 8, 5, 12-20], исследование резонансов в поглощении, обусловленных внутризонными электронными переходами с участием оптических фононов, может дать ценную информацию о параметрах электронного энергетического спектра и потенциале конфайнмента.

В связи с этим представляется актуальным исследование влияния оптических фононов на поглощение света электронами в размерно-квантованных полупроводниковых проволоках в случае, когда электрон-фононное взаимодействие искажает частотную зависимость поглощения. Одним из таких эффектов является размерно-фононный резонанс [12-13, 20], при котором поглощение света обусловлено переходами электрона между размерно-квантованными уровнями с участием оптического фонона.

Цель настоящей работы заключается в исследовании размерно-фононного поглощения электромагнитного излучения квазиодномерным квантовым каналом цилиндрической формы. Рассматривается размерно-фононное поглощение, когда расстояние между двумя уровнями произвольное. Изучаются частотные зависимости размерно-фононного поглощения в случае резонансной связи двух соседних уровней, то есть, когда переход между этими уровнями сопровождается испусканием оптического фонона.

II. Постановка задачи и основные соотношения

Рассмотрим изотропный полупроводник кубической сингонии с параболическим законом дисперсии электронов. Температура и концент-

рация электронов предполагаются достаточно низкими, так что заселен только нижний уровень размерного квантования в полупроводниковой проволоке, а оптические фононы не возбуждены. Электромагнитное излучение поглощается за счет переброса электронов на более высокие уровни с испусканием оптического фонона.

В приближении эффективной массы уравнение Шредингера в цилиндрической системе координат имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{d^2}{dz^2} + V(\rho) \right] \psi(\vec{\rho}, z) = E \psi(\vec{\rho}, z). \quad (1)$$

Здесь m_e^* – эффективная масса электрона, $\vec{\rho} = (x, y)$, $|\vec{\rho}| = \sqrt{x^2 + y^2}$, $x = \rho \sin \varphi$, $y = \rho \cos \varphi$, $\tan \varphi = x/y$, $V(\rho)$ – двумерная, бесконечно глубокая, сферически симметричная потенциальная яма, задаваемая в виде

$$V(\rho) = \begin{cases} 0 & \text{при } \rho < R \\ \infty & \text{при } \rho \geq R \end{cases} \quad (2)$$

где R – радиус площади поперечного сечения проволоки и решение уравнения (1) должно соответственно удовлетворять граничным условиям

$$\begin{cases} \psi(\vec{\rho}, z) \neq 0 \\ \psi(\vec{\rho}, z) = 0 \end{cases} \quad (3)$$

Таким образом, решение уравнения (1), удовлетворяющее граничным условиям (3) и нормированное на единицу имеет вид

$$\psi(\vec{\rho}, z) = \frac{\exp[i(m\varphi + k_z z)]}{\sqrt{\pi L_z R J_{m+1}(b_n)}} J_m(\rho), \quad (4)$$

где

$$\lambda_n = b_n / R. \quad (4a)$$

Тогда уровни энергии электрона в квантованной полупроводниковой проволоке определяются выражением

$$E(n, k_z) = \hbar^2 b_n^2 / 2m_e^* R^2 + \hbar^2 k_z^2 / 2 = E_n + \hbar^2 k_z^2 / 2m_e^*. \quad (5)$$

Здесь J_m – функции Бесселя первого рода порядка m [21], k_z – волновой вектор электрона, характеризующий свободное движение вдоль оси z , m –

азимутальное квантовое число, L_z – нормировочный множитель, b_n – корни функции Бесселя, которые приведены в таблице.

Таблица. Значения корней функции Бесселя.

Состояние	1s	1p	1d	2s
b_n	2.405	3.832	5.136	5.520
Состояние	3f	2p	2d	3s
b_n	6.380	7.016	8.417	8.654

В случае падения световой волны S -поляризации под углом θ со стороны диэлектрика доля поглощенной энергии по отношению к энергии падающей волны определяется выражением [22]

$$W = \cos\theta\alpha(\omega) \left[\cos\theta + \sqrt{(\epsilon_p / \epsilon_l) - \sin^2\theta} \right]^{-2}, \quad (6)$$

где ϵ_p и ϵ_l – статическая диэлектрическая проницаемость соответственно полупроводника и диэлектрика, ω – частота падающего электромагнитного излучения. Функция $\alpha(\omega)$ определяет частотную зависимость поглощения, она выражается через двухчастичный коррелятор $G_{\alpha\gamma}(s, \beta)$ [23]:

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi}{c\sqrt{\epsilon_l}} \sum_{\alpha\gamma} T_{\alpha\gamma}^{(i,y)} T_{\gamma\alpha}^{(i,y)} \operatorname{Re} G_{\alpha\gamma}(s, \beta), \quad (7)$$

где

$$G_{\alpha\gamma}(s, \beta) = \int_{-\infty}^0 dt e^{st} \int_0^\beta d\lambda Sp \left\{ F_0 e^{\frac{\mathcal{H}}{i\hbar}(t+\beta\lambda)} a_\gamma^\dagger a_\alpha e^{-\frac{\mathcal{H}}{i\hbar}(t+\beta\lambda)} a_\alpha^\dagger a_\gamma \right\}. \quad (8)$$

Здесь $F_0 = \exp(-\beta\mathcal{H}) / Sp \exp(-\beta\mathcal{H})$, $s = -\omega + \delta$, $\delta \rightarrow 0$, $\beta = T^{-1}$, T – температура, $a_\alpha^\dagger (a_\alpha)$ – операторы рождения (уничтожения) электрона в состоянии $\alpha = (m, n, k_z)$, $\mathcal{H}$ – полный гамильтониан электрон-фононной системы.

Матричные элементы оператора плотности тока, вычисленные на основе волновых функций (4) имеет вид

$$T_{\alpha\gamma}^{(i,y)} = ieR\hbar^{-1} (E_\gamma - E_\alpha) \delta(k_z^\gamma - k_z^\alpha) \times \\ \times (\delta_{m_\gamma, m_\alpha+1} - \delta_{m_\gamma, m_\alpha-1}) R_{n_\gamma m_\gamma}^{n_\alpha m_\alpha}, \quad (9)$$

где

$$R_{n_\gamma m_\gamma}^{n_\alpha m_\alpha} = [J_{m+1}(b_n) J_{m'+1}(b_{n'})]^{-1} \times \\ \times \int_0^1 du u^2 J_m(b_n u) J_{m'}(b_{n'} u), \quad (10)$$

e – электрический заряд электрона.

Взаимодействие электрона с объемными оптическими фононами описывается гамильтонианом

$$H_{int} = \sum_{\alpha\alpha'} [C_{\bar{q}} \mathcal{J}_{\alpha\alpha'}(\bar{q}) b_{\bar{q}} + \text{з.с.}] a_\alpha^\dagger a_{\alpha'}, \quad (11)$$

где

$$C_{\bar{q}} = -i(\hbar\omega) [4\pi\alpha_0 l_0^2 / V]^{1/2} (l_0 q)^{-1}, \\ l_0 = (\hbar / 2m_e^* \omega_0)^{1/2}, \quad (12) \\ \alpha_0 = (e^2 / 2\hbar\omega_0 l_0) (\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_p^{-1})$$

$\mathcal{J}_{\alpha\alpha'}(\bar{q})$ – матричный элемент оператора $\exp(i\bar{q}\vec{r})$, вычисленный на основе волновых функций (4)

$$\mathcal{J}_{\alpha\alpha'}(\bar{q}) = \delta(k_z^\gamma - k_z^\alpha - q_z) \times \\ \times \exp\left[i\left(\frac{\pi}{2}\right)(m_\gamma - m_\alpha)\right] D_{n_\gamma m_\gamma}^{n_\alpha m_\alpha}(qR), \quad (13)$$

где

$$D_{n_\gamma m_\gamma}^{n_\alpha m_\alpha}(qR) = 2[J_{m+1}(b_n) J_{m'+1}(b_{n'})]^{-1} \times \\ \times \int_0^1 du u^2 J_m(b_n u) J_{m'-m_\alpha}(qRu) J_{m'}(b_{n'} u). \quad (14)$$

Здесь $b_{\bar{q}} (b_{\bar{q}}^\dagger)$ – операторы уничтожения (рождения) оптического фонона с волновым вектором $\bar{q} = (q_x, q_y, q_z)$, $\bar{q} = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$, ω_0 – частота оптического фонона, ϵ_∞ – высокочастотная диэлектрическая проницаемость полупроводника, V – нормировочный объем.

III. Анализ поглощения света

III.1. Размерно-фононное поглощение

Чтобы избежать излишне громоздких формул, дальнейшее рассмотрение целесообразно провести при некоторых частных предположениях, которые не искажают качественную сторону явления.

Будем считать, что заполнен только нижний уровень размерного квантования $1s$ ($m=0$, $n=1$). Оптические фононы не возбуждены, а частота света достаточна для переброса электрона на

уровень $1p$ ($m=1, n=1$) и рождения одного фонона. Из (6) и (7) видно, что неоднородность среды в корреляторе $G_{\alpha\gamma}$ проявляется только в зависимости уровней энергии и матричных элементов от квантовых чисел. Поэтому для его вычисления применяется стандартная графическая техника [23]. Вычислим сначала $G_{\alpha\gamma}$ в линейном по электрон-фононной связи приближении, которое имеет вид, соответствующий графику на рис. 1.

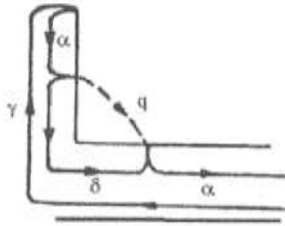


Рисунок 1. Простейший график угловой части, определяющий $G_{\alpha\gamma}$

$$G_{\alpha\gamma}(s, \beta) = (i\hbar)^{-1} \times \sum_{\delta\vec{q}} \frac{N_{\gamma} |C_{\vec{q}}|^2 |\mathcal{J}_{\alpha\delta}(\vec{q})|^2}{\hbar\omega_{\alpha\gamma} \hbar(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0)(s + i\omega_{\alpha\gamma})[s + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0)]} \quad (15)$$

Подставляя (9) и (15) в (7) и переходя от суммирования по k_z и $\vec{q}$ к интегрированию, производя интегрирование по полярному углу φ , получим, что

$$\alpha(\omega) / \alpha(0) = \int_0^{\infty} dt N_0(t) \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_0^{\infty} dy \frac{|D_{11}^{11}(yR/l_0)|^2}{[y^2 + (x-t)^2]} \delta(\Gamma + t^2 - x^2), \quad (16)$$

где

$$\alpha(0) = \frac{16\alpha_0}{\sqrt{\epsilon_f}} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \left(\frac{R}{l_0} \right)^2 |R_{11}^{10}|^2 \frac{\omega_0 \omega_{21}}{(\omega_{21} + \omega_0)(\omega - \omega_{21})},$$

$$\Gamma = (\omega - \omega_{21} - \omega_0) / \omega_0, \quad (17)$$

$$\omega_{21} = (\hbar / 2m_e^* R^2) (b_2^2 - b_1^2).$$

При низких температурах $N_0(t)$ можно заменить ступенькой, т.е. $N_0(t) = \theta(E_F - E_0 - \hbar\omega_0 t^2)$, где $\theta(x)$ есть функция Хевисайда, а $E_F - E_0 = (\pi^2 \hbar^2 / 2m_e^*) n_0$, n_0 — концентрация электронов на уровне $1s$ ($m=0, n=1$).

Таким образом, интеграл в (16) по t обрезается на $t_0 = (\pi^2 \hbar n_0 / 2m_e^* \omega_0)^{1/2}$.

При $\Gamma > 0$

$$\alpha(\omega) / \alpha(0) = \int_0^{t_0} \frac{dt}{\sqrt{\Gamma + t^2}} [D_+(\Gamma, t) + D_-(\Gamma, t)], \quad (18)$$

$$D_{\pm}(\Gamma, t) = \int_0^{\infty} y dy \frac{|D_{11}^{11}(yR/l_0)|^2}{[y^2 + (t \pm \sqrt{\Gamma + t^2})^2]}, \quad (19)$$

а при $\Gamma < 0$

$$\alpha(\omega) / \alpha(0) = \int_{\sqrt{|\Gamma|}}^{t_0} \frac{dt}{\sqrt{t^2 - \Gamma}} [D_+(|\Gamma|, t) + D_-(|\Gamma|, t)], \quad (20)$$

$$D_{\pm}(|\Gamma|, t) = \int_0^{\infty} y dy \frac{|D_{11}^{11}(yR/l_0)|^2}{[y^2 + (t \pm \sqrt{t^2 - |\Gamma|})^2]}. \quad (21)$$

$\alpha(\omega) = 0$, если $|\Gamma| \geq t^2$. Используя асимптотические разложения модифицированных функций Бесселя [10], можно показать, что при $|\Gamma| \rightarrow 0$ размерно-фононное поглощение содержит квадратичную логарифмическую сингулярность, т.е. $\alpha(\omega) / \alpha(0) \sim (\ln|\Gamma|)^2$.

Если $\Gamma \gg t^2$, то, как это следует из (18) и (19), $\alpha(\omega) / \alpha(0) \cong t_0 / \Gamma^{3/2}$.

III.2. Резонансное электрон-фононное взаимодействие

Рассмотрим важный случай, когда $E_2 - E_1 \cong \hbar\omega_0$, и электрон, заброшенный на уровень $1p$ ($m=1, n=1$), может испустить оптический фонон и перейти на уровень $1s$ ($m=0, n=1$). При этом нельзя ограничиться линейным по константе связи α_0 приближением, так как графики более высоких порядков логарифмически велики вблизи частот $\omega \cong 2\omega_0$. Результат суммирования графиков сводится к замене в функции $G_{\alpha\gamma}$ (формула (15)) знаменателя $[s + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0)]$ на $[s + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0) - \Sigma]$.

Функция Σ , определяющая поведение поглощения в области резонанса, представляется суммой неприводимых графиков, в которых фононные линии расположены на верхнем горизонтальном участке слева от внешней фононной линии (рис. 2).

Функция Σ равна

$$\Sigma = -\omega_0 \frac{8.7\alpha_0}{\sqrt{\Gamma + \lambda + t^2}}, \quad (22)$$

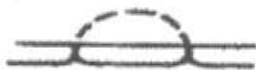


Рисунок 2. Фрагмент графика, определяющий функцию Σ .

где

$$\lambda = (\omega_{21} - \omega_0) / \omega_0. \quad (23)$$

Уравнение для определения спектра электрон-фононной системы имеет вид

$$\varepsilon + \frac{i\eta}{\sqrt{\varepsilon + \lambda}} = 0, \quad (24)$$

где

$$\varepsilon = \Gamma + t^2, \quad \eta = 8.7\alpha_0. \quad (25)$$

Если $\lambda=0$ (резонансный случай, $E_2 - E_1 \cong \hbar\omega_0$), то корни уравнения (24) при $\alpha_0 = 0.02$ (InSb) будут следующими:

$$\varepsilon_1 = 0.15 + 0.26i; \quad \varepsilon_2 = -0.3. \quad (26)$$

Для получения частотной зависимости поглощения необходимо в формуле (15) знаменатель $[s + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0)]$ заменить на $[s + i(\omega_{\delta\gamma} + \omega_0) - \Sigma]$, затем из (22) Σ подставить в (15) и, наконец, полученное выражение подставить в (7); получим

$$\alpha(\omega) / \alpha(0) = \int_0^{\omega_0} dt \int_0^{\infty} \frac{|D_{11}^{II}(yR/l_0)|^2 y dy}{y^2 + t^2} F(\Gamma, t); \quad (27)$$

$$F(\Gamma, t) = \text{Re} \frac{i}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left\{ \Gamma + t^2 + \frac{i\eta}{\sqrt{\Gamma + \lambda + t^2}} - x^2 + i\delta \right\}^{-1}. \quad (28)$$

Полагая $\lambda=0$ и разделяя вещественную и мнимую части в (28), получим при $\Gamma > 0$

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) / \alpha(0) = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\omega_0} \frac{f(\Gamma, t) B(t) dt}{\left\{ \left[\left(\Gamma + t^2 - \frac{\eta^{2/3}}{2} \right)^2 + \frac{3}{4} \eta^{4/3} \right] (\Gamma + t^2 + \eta^{2/3}) \right\}^{1/2}} \end{aligned} \quad (29)$$

где

$$f(\Gamma, t) = [(\Gamma + t^2)^2 + \sqrt{\Gamma + t^2} \sqrt{(\Gamma + t^2)^2 + \eta^2}]^{1/2}. \quad (30)$$

Анализируя (29), можно увидеть, что эффект существен при малых t . Так что при $t^2 \ll |\Gamma|$, пренебрегая t^2 по сравнению с Γ , получим при $\Gamma > 0$:

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) / \alpha(0) = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{f(\Gamma, 0)}{\left\{ \left[\left(\Gamma - \frac{\eta^{2/3}}{2} \right)^2 + \frac{3}{4} \eta^{4/3} \right] (\Gamma + \eta^{2/3}) \right\}^{1/2}} \int_0^{\sqrt{\Gamma}} dt B(t); \end{aligned} \quad (31)$$

когда $-\eta^{2/3} \leq \Gamma \leq 0$,

$$\begin{aligned} \alpha(\omega) / \alpha(0) = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{(\Gamma^2 + \eta\sqrt{|\Gamma|})^{1/2}}{\left\{ (\Gamma^2 + \eta^{2/3}|\Gamma| + \eta^{4/3}) \right\}^{1/2} (\eta^{2/3} - |\Gamma|)} \int_0^{\sqrt{\Gamma}} dt B(t). \end{aligned} \quad (32)$$

Из приведенных формул видно, что размерно-фононное поглощение в цилиндрической полупроводниковой проволоке имеет два максимума, которые расположены в точках $\Gamma_1 = -\eta^{2/3}$ и $\Gamma_2 \cong \pi^{2/3} 2$. Расстояние между максимумами $\Delta = (3/2)\pi^{2/3} \hbar\omega_0$, т.е. $\Delta = 10.35$ мэВ (InSb), что существенно больше, чем в объемном случае [24].

IV. Обсуждение результатов

Развитая выше теория предсказывает резкое изменение спектра размерно-фононного резонанса в случае резонансной связи между уровнями размерного квантования, т.е. когда расстояние между уровнями, участвующими в оптическом переходе, близко к энергии длинноволнового оптического фонона $E_2 - E_1 \cong \hbar\omega_0$. Такая ситуация возможна в полупроводниковых проволоках с радиусом поперечного сечения $R = 32.5$ нм (InSb). Линии размерно-фононного поглощения расщепляются на два компонента, расстояние между которыми определяется резонансным электрон-фононным взаимодействием. Величина расщепления при значениях константы связи для InSb $\Delta = 10.35$ мэВ существенно больше расщепления линии в циклотрон-фононном резонансе [25].

В каких веществах следует ожидать появления рассмотренного расщепления линий на два компонента? Это должны быть кристаллы с малой эффективной массой электронов, сравнительно большой константой электрон-фононной связи и не очень малой шириной запрещенной зоны. Последнее условие необходимо для пренебрежения непараболичностью закона дисперсии электронов, что сделано выше. К таким веществам относятся многие из соединений группы A_3B_5 , так как у них константа электрон-фононной связи $\alpha_0 \sim 0.01$, ширина запрещенной зоны $E_g \sim 1$ эВ. Естественно, что в реальной ситуации линии расширяются, и картина расщепления становится менее отчетливой. Однако рассмотренный выше механизм рассеяния на оптических фононах является резко немонотонным (в отличие от диссипативных механизмов, которые монотонно зависят от внешней частоты) и может быть выделен на их фоне.

Метаданные

Features of size-phonon absorption of light in cylindrical wires

B.E. Eshpulatov, D.Sh. Khuzhanova, A.Sh. Khuzhanov

Samarkand branch of the Tashkent University of Information Technologies named after Muhammad al-Khorezmiy. Sh. Mirzo, 47A, 100140, Samarkand, Uzbekistan

The theory of the shape of the line of size-phonon absorption of light in a size-quantized cylindrical semiconductor wire is developed. The wave functions and the energy spectrum of the electron are obtained. On the basis of these wave functions, the matrix element of the Fourier operator of the phonon expansion is determined, and the Hamiltonian of the interaction of an electron with bulk optical phonons is obtained. To estimate the terms of the perturbation theory series, a standard graphic technique is used. It is shown that the size-phonon absorption contains a quadratic logarithmic singularity. The frequency dependences of the resonant size-phonon absorption are obtained, when the transition between the levels is accompanied by the emission of an optical phonon. The spectra of the electron-phonon system are determined in the case of resonance coupling between adjacent levels. It is shown that the resonant size-phonon absorption splits into two components, the distance between which is much greater than in the bulk case.

Keywords: line shape, size-phonon absorption, frequency dependences between levels, spectra, electron-phonon system, line splitting.

Литература (References)

- [1] T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern. Electronic properties of two-dimensional system. *Rev. Mod. Phys.* **54**, No.2, 437 (1982).
- [2] K. Fon Klitzing. Kvantoviy effect Kholla. *Uspexi Fizicheskix Nauk* **150**, No.1, 107 (1986).
- [3] V.V. Starostin. *Materialy i metodi nanotekhnologii* (BINOM, Moskva, 2010).
- [4] V.A. Volkov, I.M. Gradnenskiy. Dvumerniy electron-gaz geteroperekhody. *Svoystva i primeneniye. Mikroelektronika* **11**, No.3, 195 (1982).
- [5] J.I. Alfayrov. Dvoynye geterostrukturi: konsepsiya i primeneniya v fizike, elektronnyye tekhnologii. *Uspekhi Fizicheskix Nauk* **172**, No.9, 1068 (2002).
- [6] L.E. Vorob'ev, E.L. Ivchenko, D.A. Firsov, V.A. Shalagin. *Opticheskie svoystva nanostruktur* (Nauka, Sankt-Peterburg, 2002).
- [7] E. Kasapoglu, H. Sari, I. Sokmen. Intersubband optical absorption in a quantum well under a tilted magnetic field. *Superlat. and Microstruct.* **29**, No.1, 25 (2001).
- [8] G.B. Ibragimov. Optical intersubband transitions in quantum wires with an applied magnetic field. *Semicond. Phys. Quan. Elect. and Optoelect.* **7**, No.3, 283 (2004).
- [9] N. Buecking, S. Butscher, M. Richter, C. Weber, S. Declair, M. Woerner, K. Reimann, P. Kratzer, M. Scheffler, and A. Knorr. Theory of electron-phonon interactions on nanoscales: semiconductor surfaces and two dimensional electron gases. *Proc. of SPIE* **6892**, 689209 (2008).
- [10] S. Kuhn, F. Schulze, M. Richter, A. Knorr, and A. Carmele. Theory of phonon-assisted intraband transitions in semiconductor quantum dots. *Proc. of SPIE* **8260**, 826004 (2012).
- [11] V.N. Kast, A.V. Platonov, G.E. Siyrlin, A.D. Buravlev, A. Delga, L. Besombes, H. Mariette, V.P. Kochereshko. Polyarizatsionnaya spektroskopiya odinochnoy kvantovoy tochki i odinochnoy kvantovoy niti. *Fizika Tverdogo Tela* **60**, No.12, 445 (2018).
- [12] F. Bass, A.Yu. Matulis. Razmerno-fononnye skachki poglosheniya sveta v poluprovodnikovyykh plenках. *Fizika Tverdogo Tela* **12**, 2039 (1970).
- [13] L.I. Korovin, B.E. Eshpulatov. Pinnigovay astruktura razmerno-fononnoy rezonansa v inversionnykh sloyax. *Fizika Tverdogo Tela* **23**, No.10, 3056 (1981).
- [14] P.C. Sercel, and K.J. Vahala. Polarization dependence of optical absorption and emission in quantum wires. *Phys. Rev. B* **44**, No.11, 5681 (1991).
- [15] I.P. Ipatova, A.Yu. Maslov, O.V. Proshina. Mnogofononniye protsessy pri opticheskix perexodakh v kvantovyykh nanostrukturakh. *Fizika Tverdogo Tela* **37**, No.6, 1819 (1995).
- [16] H.-J. Xie, Ch.-Y. Chen, and B.-K. Ma. The bound polaron in a cylindrical quantum-well wire with a finite confining potential. *J. Phys.: Condens. Matter.* **12**, 8623 (2000).
- [17] Y.-B. Yu, Shi-N. Zhu, K.X. Guo. Polaron effects on third-harmonic generation in cylindrical quantum-well wires. *Solid State Communications* **132**, 689 (2004).
- [18] E.P. Sinyavskiy, R.A. Xamidullin. Mnogo fononnoye poglosheniye sveta v razmerno-kvantovannykh sistemakh v odnorodnykh elektricheskoy i magnitnoy polyakh. *Fizika Tverdogo Tela* **47**, No.10, 1881 (2005).

- [19] Y.-B. Yu, Shi-N. Zhu, K.-X. Guo. Electron-phonon interaction effect on optical absorption in cylindrical quantum wires. *Solid State Communications* **139**, 76 (2006).
- [20] B.E. Eshpulatov, E.U. Arzikulov. Pinningovaya struktura razmerno-fononnogo rezonansa v kvantovykh nitkakh. *Elektronnaya obrabotka materialov* No.2, 105 (2008).
- [21] E. Enke, F. Ende, F. Lyosh. *Spestsiyal'nye funktsii* (Nauka, Moskva, 1968).
- [22] L.I. Korovin, B.E. Eshpulatov. Meizonnoe magneto-opticheskoe pogloshenie pri poverkhnostnykh sloem poluprovodnika. *Fizika Tverdogo Tela* **21**, No.12, 3703 (1979).
- [23] O.V. Konstantinov, V.I. Perel. Graficheskaya tekhnika dlya vychisleniya kineticheskikh velichin. *JETP* **39**, No.1(7), 197-208 (1960).
- [24] L.I. Korovin, S.T. Pavlov. O roli opticheskikh fononov i mejdutonnykh magneto-opticheskikh poglosheniye poluprovodnikov. *JETP* **53**, No.5(11), 1708-1716 (1967).
- [25] L.I. Korovin, B.E. Eshpulatov. Siklotron-fononnyy rezonans v MDP-strukturax. *Fizika Tverdogo Tela* **23**, No.4, 1048-1053 (1981).

Цилиндрик симларда ёруғликнинг ўлчамли-фонон ютилиши хусусиятлари

Б.Э. Эшпулатов, Д.Ш. Хужанова, А.Ш. Хужанов

Мухаммад ал-Хоразмий номидаги Тошкент ахборот технологиялари университетининг Самарқанд филиали, III. Мирзо, 47А, 100140, Самарқанд, Ўзбекистон

Ўлчамли-квантланган цилиндрик яримўтказгичли симда ёруғликнинг ўлчамли-фонон ютилиш чизигининг шакли назарий ўрганилган. Электроннинг тўлқин функцияси ва энергетик спектри аниқланган. Бу тўлқин функцияси асосида фононнинг Фур'е компонентаси матрица элементи аниқланган ва электроннинг ҳажмий оптик фонон билан ўзаро таъсири Гамильтониани топилган. Ҳалаёнлар назарияси ҳадларини баҳолаш учун стандарт график техникасидан фойдаланилган. Ўлчамли-фонон ютилишида квадратик логарфмик сингулярлик мавжудлиги кўрсатилган. Резонанс ўлчамли-фонон ютилишининг частотага боғлиқлиги, энергетик ҳолатлар орасидаги фарқ оптик фонон энергиясига тенг бўлганидаги ўрганилган. Электрон-фонон тизимининг спектрлари қўшни энергетик сатҳлар орасида резонансли боғланиш мавжуд бўлганида аниқланган. Бунда ўлчамли-фонон ютилиши иккита компонентага ажралиши кўрсатилган ва улар орасидаги масофа ҳажмли намунада бўладиган ажралишдагига қараганда анча катта эканлиги кўрсатилган.

Калит сўзлар: Чизик шакли, ўлчамли-фонон ютилиш, частотага боғлиқлик, ҳолатлар орасидаги спектрлар, электрон-фонон тизими, чизикларнинг ажралиши.

Морфология, состав и структура поверхности пленок NiSi₂/Si, полученных методом твердофазной эпитаксии

Н.М. Мустафоева*, А.К. Ташатов

Каршинский государственный университет, Кучабог-17, 180003, Карши, Узбекистан

Получена 12.12.2020

* Corresponding author: e-mail: mustafoveva@gmail.com Phone: +99897 3132277

В работе имплантацией ионов Ni⁺ в Si в сочетании с отжигом в приповерхностном слое Si на глубине 15–25 нм получены нанокристаллические фазы и слои NiSi₂. При $D=8 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ формировалась нанопленочная гетероструктура типа Si/NiSi₂/Si. Впервые оценены ширины запрещенных зон нанокристаллических фаз и слоев NiSi₂, созданных в приповерхностной области Si. Методами оже-электронной спектроскопии, растровой электронной и атомно-силовой микроскопии изучено формирование эпитаксиальных слоев NiSi₂ при осаждении Ni в Si с последующим отжигом. Показано, что при толщинах $h < 150 \text{ Å}$ формируются островковые пленки NiSi₂. Ширины запрещенных зон островков и пленок NiSi₂ практически не отличаются друг от друга и составляют ~0.6 эВ, а значения ρ отличаются на несколько порядков.

Ключевые слова: нанопленки NiSi₂, структура поверхности, Оже-электронная спектроскопия, твердофазное осаждение, морфология, гетероструктура, ширина запрещенной зоны, растровая электронная и атомно-силовая микроскопия.

In this work, by implantation of Ni⁺ ions in Si in combination with annealing the nanocrystalline phases and layers of NiSi₂ were obtained in near surface Si layer at the depth of 15–25 nm. At $D = 8 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, a nanofilm heterostructure of the Si/NiSi₂/Si type was formed. For the first time, the band gap widths of nanocrystalline phases and NiSi₂ layers formed in near surface region of Si have been estimated. The formation of epitaxial layers of NiSi₂ during the deposition of Ni in Si with subsequent annealing has been studied using Auger electron spectroscopy, scanning electron and atomic force microscopy. It is shown that island films of NiSi₂ are formed at thicknesses $h < 150 \text{ Å}$. The band gap of the islands and NiSi₂ films practically do not differ from each other and amounted to ~0.6 eV, and the values of ρ differ by several orders of magnitude.

Keywords: NiSi₂ nanofilms, surface structure, Auger electron spectroscopy, solid-phase deposition, morphology, heterostructure, band gap, scanning electron and atomic force microscopy.

<https://doi.org/10.52304/v23i2.241>

I. Введение

Гетероструктуры типа NiSi₂/Si имеют большие перспективы в создании новых приборов функциональной электроники, в частности, в создании СВЧ-транзисторов, детекторов излучения, омических контактов и барьерных структур

[1–7]. Большинство силицидных фаз обладают свойствами, характерными для металлов [2]. Физико-химические свойства тонких и сверхтонких плёнок хорошо изучены только для силицидов Na, Ba, Pd и Co. В работах [4, 8–10] показано, что при отжиге тонких пленок Co и Pd в кремнии

происходит наноструктурирование пленок и образование силицидов этих металлов. Наиболее тонкие пленки и нанокристаллические фазы CoSi_2 , BaSi_2 и NaSi_2 получены методом низкоэнергетической ($E_0 \leq 5$ кэВ) ионной бомбардировки в сочетании с отжигом [4, 11–14]. Использование системы CoSi_2/Si в МДП и ПДП структурах, главным образом, обусловлено его уникальными электро-физическими свойствами и малым электрическим сопротивлением ($\rho \approx 20\text{--}40$ мкОм·см) [15].

Данная работа посвящена изучению состава, морфологии и электронной структуры нанопленок NiSi_2 , полученных на поверхности $\text{Si}(111)$ с использованием метода твердофазного осаждения и ионной бомбардировки.

II. Методика экспериментов

Перед осаждением пленок кремниевые образцы $\text{Si}(111)$ КЭФ-4.5 очищали прогревом в условиях сверхвысокого вакуума ($P=10^{-7}$ Па) при $T=1100$ К в течение 2–3 часов и $T=1400$ К в импульсном режиме. При этом поверхность полностью очищается от кислорода (в пределах чувствительности ОЭС) и на картине ДМЭ устанавливается структура характерная для 7×7 .

Перед напылением проволоки из особо чистого Ni обезгаживали в течение 5–6 часов в вакууме не хуже 10^{-5} Па. Скорость напыления пленок определяли предварительно с использованием метода ОЭС в сочетании с отжигом, она составила ~ 0.5 Å/мин. Напыление атомов Ni , прогрев образцов, исследования их состава и параметров энергетических зон с использованием методов оже-электронной и ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии (ОЭС и УФЭС) и измерением интенсивности проходящего через образец света проводили на одном и том же приборе в условиях сверхвысокого вакуума ($P=10^{-7}$ Па). Морфологию поверхности изучали методами растровой электронной и атомно-силовой микроскопии (РЭМ и АСМ). Напыление Ni различной толщины (от 10 Å до 100 Å) проводили при комнатной температуре, при этом образуются сплошные аморфные пленки, а на границе раздела Ni/Si не наблюдалось заметной взаимодиффузии Ni в Si и Si в Ni . После каждого цикла осаждения проводили прогрев. Заметная взаимодиффузия атомов, образование соединений между атомами Ni и Si и некоторая кристаллизация пленки и ее распад на островки наблюдались начиная с $T=550\text{--}600$ К.

III. Экспериментальные результаты и их обсуждение

Толщина пленки NiSi_2 была в 2.5–3 раза больше, чем толщина напыленной пленки Ni . На рис. 1 приведены АСМ-изображения поверхности $\text{Si}(111)$ с пленкой NiSi_2 толщиной ~ 50 Å. Видно, что пленки имеют островковый характер в форме конуса (или пирамиды) и их высота доходит до

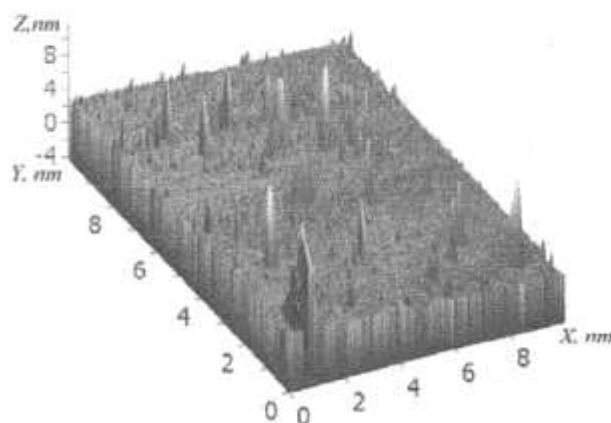


Рисунок 1. АСМ-изображения поверхности $\text{Si}(111)$ с пленкой NiSi_2 толщиной 50 Å.

7–8 нм. Анализ РЭМ-картин показал, что островки имеют форму многогранника с линейными размерами $\sim 0.2\text{--}0.3$ мкм. Расстояние между центрами этих фаз $\sim 0.8\text{--}1$ мкм. Как видно из рис. 1, наряду с крупными островками, на поверхности формируется множество мелких островков (фаз). Дальнейшее увеличение толщины пленок (времени твердофазного осаждения) не приводит к заметному росту высоты основных островков. При этом наблюдалось увеличение поверхностных размеров крупных островков и увеличение размеров мелких островков. В случае пленки NiSi_2 с $h=150$ Å практически 80–85% поверхности Si покрываются островками NiSi_2 . Размеры островков составляют 0.3–0.5 мкм. При этом на картине дифракции быстрых электронов обнаруживаются концентрические кольца, характерные для поликристаллических образцов. По-видимому, хотя после прогрева при $T=800$ К происходит кристаллизация пленки, однако кристаллографические направления отдельных кристаллов не совпадают друг с другом. Коалесценция островков и образование сплошной пленки происходит при толщине ~ 200 Å. Однако при этой толщине пленки получаются неравномерными, а значения h лежат в пределах 100–150 Å. Наиболее совершен-

ные однородные эпитаксиальные пленки NiSi₂ образуются при толщине $h \geq 200$ Å после прогрева при $T = 950$ К. Анализ АСМ и РЭМ изображений совместно с ОЭС показал, что при малых толщинах ($h \leq 10-15$ Å), начиная с $T = 750$ К, происходит полное испарение пленки Ni. В интервале $h_{\text{Ni}} = 20-60$ Å после прогрева при $T = 800$ К в течение 1 часа формировались островковые пленки, а в интервале $h_{\text{Ni}} = 80-200$ Å после прогрева при $T = 850-900$ К – сплошные пленки NiSi₂. Дальнейшее увеличение времени отжига не приводит к заметному изменению состава и структуры пленок. При $T = 1000$ К наблюдался распад пленки на островки и при $T = 1100$ К – ее испарение.

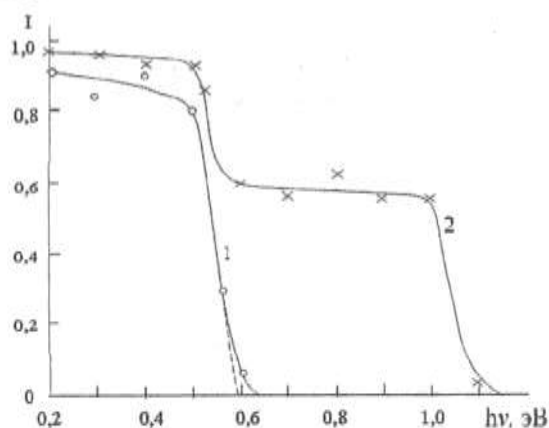


Рисунок 2. Зависимость интенсивности I проходящего света от энергии фотонов для Si с нанопленкой NiSi₂ толщиной h , Å: 1 – 5; 2 – 200.

На рис. 2 приведены зависимости интенсивности проходящего света I от энергии фотонов $h\nu$ для Si с нанопленкой NiSi₂ толщиной $h = 50$ Å и $h = 200$ Å. Во втором случае (см. рис. 2) резкое уменьшение интенсивности проходящего света наблюдается при двух значениях $h\nu = 0.5$ и 1.0 эВ, которые связаны с поглощением света соответственно на участках, покрытых наноструктурами NiSi₂, и на участках, не покрытых NiSi₂.

Экстраполяция этих кривых к оси $h\nu$ показывает, что для NiSi₂ значение ширины запрещенной зоны $E_g \sim 0.6$ эВ, а для Si ~ 1.1 эВ. В случае сплошной пленки NiSi₂ значение I резко уменьшается до нуля в интервале $h\nu = 0.5-0.6$ эВ.

Изучение профиля распределения атомов Ni по глубине системы NiSi₂/Si показало, что толщина переходного слоя, образующегося между пленкой и подложкой не превышает 50–60 Å. Это объясняется близостью параметров кристаллической решетки Si ($a = 5.43$ Å) и NiSi₂ ($a = 5.41$ Å). Формирование системы силицид-кремний с резкой границей важно при создании приборов СВЧ-электроники (транзисторов, диодов, детекторов излучения и др.).

Ниже в таблице представлены характеристики формирующихся пленок NiSi₂/Si(111) при твердофазной эпитаксии и значения их удельных сопротивлений.

Таблица. Характеристики формирующихся пленок NiSi₂/Si(111) при твердофазной эпитаксии и их удельные сопротивления

Номер образца	$h_{\text{Ni}}, \text{Å}$	$h_{\text{NiSi}_2}, \text{Å}$	$T_{\text{эпит}}, \text{К}$	Вид пленки	ρ , мкОм·см
1	15–20	50	800	островковая	2×10^5
2	35–40	100	850	островковая	5×10^2
3	50–60	150	850	островковая	–
4	80	200	900	сплошная, н. о *	100
5	200	550	950	сплошная, о **	50

* неоднородная, ** однородная.

Видно, что в случае островковой пленки значение ρ очень высоко. При $h_{\text{NiSi}_2} = 200$ Å формируется сплошная пленка, однако значение ρ немного больше, чем ρ пленки с толщиной 550 Å. По-видимому, при $h = 200$ Å пока еще пленки не имеют высокого совершенства.

На рис. 3 приведены фотоэлектронные спектры Si(111) и Si с нанокристаллами и нанопленкой NiSi₂, полученные при $h\nu = 10.8$ эВ. По оси абсцисс отложена энергия связи электронов, отсчитанная относительно уровня Ферми. Видно, что форма и положения основных пиков толстой пленки NiSi₂ ($h = 200$ Å) существенно отличаются

от формы и положения пиков для Si. При этом в спектре обнаруживаются пики с энергиями $E_{\text{св}} = -0.3; -0.9; -2.2; -4.2$ эВ. Анализ этого спектра и сравнение его со спектрами Si и Ni дает возможность предположить, что пик $E_{\text{св}} = -0.3$ эВ формируется вследствие гибридизации M_3 состояний кремния и M_3 состояний Ni, пик $E_{\text{св}} = -0.9$ эВ – вследствие гибридизации M_2 состояния Si и M_3 состояния Ni, пик $E_{\text{св}} = -2.2$ эВ – вследствие гибридизации M_1 состояния Si и M_4 состояния Ni, а пик $E_{\text{св}} = -4.2$ эВ, по-видимому, относится к Si.

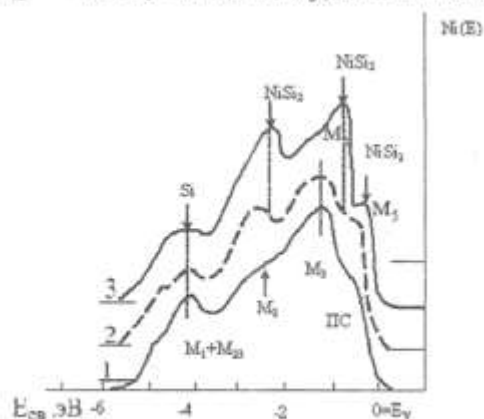


Рисунок 3. УФЭС Si с нанопленкой NiSi_2 толщиной, Å: 0 (1), 50 (2), 200 (3).

Пленки NiSi_2 с $h = 50$ Å имеют островковый характер, поэтому в его спектре обнаруживаются пики, характерные как для Si, так и NiSi_2 .

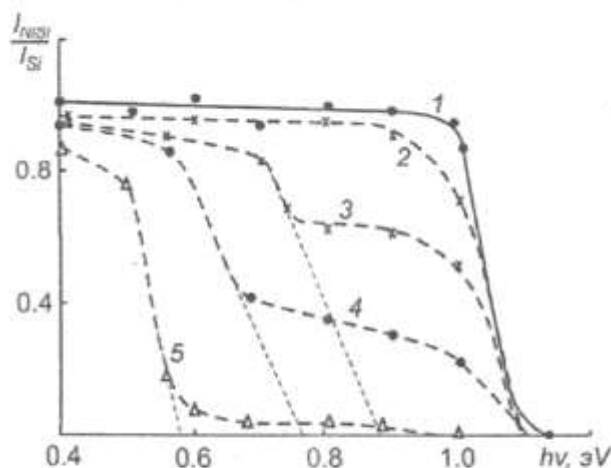


Рисунок 4. Зависимости интенсивности проходящего света от энергии фотонов для Si(111), имплантированного ионами Ni^+ с $E_0 = 25$ keV, при дозах D , см^{-2} : 0 (1); 2×10^{14} (2); 2×10^{15} (3); 8×10^{15} (4); 8×10^{16} (5), и отожженного при $T = 800\text{--}900$ К.

Такие же исследования проводили для Si (рис. 4), имплантированного ионами Ni^+ с энергией $E_0 = 25$ keV и дозами D , см^{-2} : чистый Si (1); 2×10^{14} (2); 2×10^{15} (3); 8×10^{15} (4) и 8×10^{16} (5).

Последняя доза соответствует дозе насыщения. Результаты ОЭС показали, что во всех случаях постимплантационный отжиг при температурах $T = 800, 850$ и 900 К приводит к формированию эпитаксиальных нанокристаллических фаз и нанослоя NiSi_2 . При этом толщины нанопазы NiSi_2 и нанослоя NiSi_2 мало отличаются и составляют $\sim 10\text{--}12$ нм. По-видимому до дозы $D \approx 10^{15}$ см^{-2} нанокристаллические фазы NiSi_2 формируются в виде сфер [16–19], а при $D \approx 10^{15}$ см^{-2} переходят в форму, близкую к эллипсоиду, и при $D = 8 \times 10^{16}$ см^{-2} образуется сплошной однородный слой NiSi_2 . Расчеты показали, что объем нанокристаллической фазы NiSi_2 для образца № 3 составляет $(1\text{--}1.2) \times 10^{-18}$ см^3 , а для образца № 4 $(3\text{--}3.5) \times 10^{-18}$ см^3 . Средняя глубина формирования наноструктур лежит в приповерхностных слоях 20–22 нм.

Для этих образцов были сняты зависимости интенсивности I проходящего света от энергии (длины волны) фотона в интервале $h\nu = 0.4\text{--}1.2$ эВ (рис. 4). Здесь $I = I_{\text{NiSi}_2}/I_{\text{Si}}$, где I_{Si} – интенсивность света, проходящего через чистый Si, а I_{NiSi_2} – через Si с внутренними нанопазы (слоями) NiSi_2 . Из рис. 4 видно, что в случае чистого кремния I резко уменьшается, начиная с $h\nu = 1.0$ эВ, а в случае Si с нанопазы NiSi_2 резкое уменьшение I наблюдается при двух значениях дозы ионов Ni нанокристаллической фазы, второе уменьшение относится к не закрытым нанопазы участкам Si. Экстраполяция этих участков кривой $I(h\nu)$ к оси $h\nu$ дает значение E_g исследуемых материалов. Видно, что E_g для чистого Si составляет 1.1 эВ, для нанопазы NiSi_2 с объемом $(1\text{--}1.2) \times 10^{-18}$ см^3 – 0.88 эВ, для нанопазы с объемом $(3\text{--}3.5) \times 10^{-18}$ см^3 – 0.77 эВ, а для сплошного слоя NiSi_2 – 0.57 эВ. Эти результаты показывают, что E_g нанокристаллических фаз значительно больше, чем для нанослоя NiSi_2 .

III. Заключение

Таким образом, на основе анализа экспериментальных результатов можно заключить, что в процессе твердофазного осаждения Ni в Si в сочетании с отжигом на поверхности Si формируются эпитаксиальные нанопленки NiSi_2 .

При толщинах $h \leq 150$ Å пленки имеют островковый характер. Из-за близости параметров решетки NiSi₂ и Si на границе NiSi₂/Si не возникает заметного напряжения и, следовательно, формируется сравнительно узкий переходной слой (50–60 Å). Ширина запрещенной зоны нанокристаллических фаз с ростом их размеров от $(1-1.2) \times 10^{-18}$ см³ до $(3-3.5) \times 10^{-18}$ см³ изменялась система типа Si/NiSi₂/Si. Показано, что E_g нанослоев NiSi₂ равна ~0.58 eV. При высокоэнергетической имплантации ионов Ni⁺ в зависимости от дозы ионов в приповерхностном слое Si формируются нанокристаллы и слои NiSi₂.

Метаданные

Morphology, composition and surface structure of NiSi₂/Si films obtained by solid-phase epitaxy

N.M. Mustafoeva, A.K. Tashatov

Karshi State University, Kuchabog str, 17, 180003, Karshi, Uzbekistan

In this work, by implantation of Ni⁺ ions in Si in combination with annealing the nanocrystalline phases and layers of NiSi₂ were obtained in near surface Si layer at the depth of 15–25 nm. At $D = 8 \times 10^{16}$ cm⁻³, a nanofilm heterostructure of the Si/NiSi₂/Si type was formed. For the first time, the band gap widths of nanocrystalline phases and NiSi₂ layers formed in near surface region of Si have been estimated. The formation of epitaxial layers of NiSi₂ during the deposition of Ni in Si with subsequent annealing has been studied using Auger electron spectroscopy, scanning electron and atomic force microscopy. It is shown that islands and films of NiSi₂ are formed at thicknesses $h < 150$ Å. The band gap of the islands and NiSi₂ films practically do not differ from each other and amounted to ~0.6 eV, and the values of ρ differ by several orders of magnitude.

Keywords: NiSi₂ nanofilms, surface structure, Auger electron spectroscopy, solid-phase deposition, morphology, heterostructure, band gap, scanning electron and atomic force microscopy.

Литература (References)

- [1] M.V. Gomoyunova, I.I. Pronin, N.R. Gall', S.L. Molotcov, D.V. Vyalykh. *Fizika tverdogo tela* (FTT) 45. No.8, 1510 (2003).
- [2] A.A. Altuxov., V.V. Jirnov., A.A. Altuxov., V.V. Jirnov. *Analiz morfologii i tekstometrii plynok CoSi/Si(100), poluchennex metodami TFE i RE // Materialy II-go Vsesoyuznogo mejotraslevogo soveshchaniya "Tonkie plenki v elektronike": Moskva-Ijevsk. c. 15-22* (1991).
- [3] Colinge J.P. // *Material Research Society Proceedings. V. 35. P. 653. <http://dx.doi.org/doi.10.1557/PROC-35-653>* (1985)
- [4] Ergashov Y.S., Tashmukhamedova D.A., Umirzakov B.E. *Poluchenie nanorazmernyx faz silitsidov metallov v pri-poverxnostnoy oblasti kremniya i izuchenie ix elektronnykh struktur metodom prohojdeniya sveta. //Poverxnost'. Rentgenovskie, sinkrotronnye i neytronnye issledovaniya, № 4, s. 104–108* (2014)
- [5] D.G. Gromov, O.V. Pyatlova, S.V. Bulyaroskiy, A.N. Belov, A.A. Raskin. *FTT* 55, No.3, 562-566 (2019) <http://journals.ioffe.ru/articles/973>
- [6] K. Hoppe, W.R. Fahrner, D. Fink, S. Dhamodoran, A. Petrov, A. Chandra, A. Saad, F. Faupel, V.S.K. Chakravadhanula, V. Zaporotchenko. *Nucl. Instr. Meth. B* 266, No.8, 1642-1646 (2008). <http://doi.org/10.1016/j.nimb.2007.12.069>
- [7] T. Priolo, T. Gregorkiewicz, M. Galli, T.F. Krauss. *Nature Nanotechnol.* 9, No.1, 19-32 (2014).
- [8] R. Suryana, O. Nakatsuka, S. Zaima. *Jpn. J. Appl. Phys.* 50, 05 EA 09-1 (2011).
- [9] L.P. Andriev, V.V. Barantsev, Ya.A. Solov'ev, M.V. Tarasikov. *Tekhnologiya i konstruirovaniye v elektronnoy apparature* No.4, 55 (2005).
- [10] S.V. Tomilin, A.S. Yattovskiy, O.A. Tomilina, G.R. Mikaelyan. *FTP* 47, No.6, 772 (2013).
- [11] S.B. Donaev, B.E. Umirzakov, D.A. Tashmukhamedova. *Nanorazmernye struktury v ionno-implantirovannykh Si i GaAs. LAP, Germaniya, s. 202* (2016).
- [12] X.X. Boltaev, D.A. Tashmukhamedova, B.E. Umirzakov. *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkrotronnye i neytronnye issledovaniya* No.4, 24 (2014).
- [13] B.E. Umirzakov. *Poverkhnost'* No.9, 119-123 (1992).
- [14] B.E. Umirzakov, D.A. Tashmukhamedova, M.K. Ruzibaeva, A.K. Tashatov, S.B. Donaev. *JTF* 83, No.9, 146-149 (2013). [B.E. Umirzakov, D.A. Tashmukhamedova, M.K. Ruzibaeva, A.K. Tashatov, S.B. Donaev, B.B. Mavlyanov. *Technical Physics* 58(9), 1383-1386 (2013)].
- [15] G.V. Samsonov, L.A. Dvorina, B.M. Rud'. *Silistidy* (Mjsskov, Metallurgiya, 1979).
- [16] Yo.S. Ergashov, B.E. Umirzakov. *JTF* 83, №2, 1859-1862 (2018)
- [17] A.K. Tashatov, N.M. Mustafoeva. *Formirovaniye struktury nanoplenok NiSi₂/Si. QarDU xabarlari* №3, 16-19 (2017).
- [18] A.K. Tashatov, N.M. Mustafoeva. *Surface morphology of NiSi₂/Si films obtained by the method of solid-phase deposition. Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques* 14, No.1, 81-84 (2020).
- [19] A.K. Tashatov, B.E. Umirzakov N.M. Mustafoeva. *Izuchenie morfologii poverkhnosti s ispol'zovaniem metodov REM i ASM. VI Mejdunarodnaya konferentsiya "Lazernye, plazmennye issledovaniya i texnologii (LaPLAZ-2020, Moskva, c. 92-93, 2020).*

Қаттиқ фазали эпитаксия усули билан олинган NiSi_2/Si плёнкасининг юза морфологиясини, таркибини ва сирт тузилишини аниқлаш

Н.М. Мустафоева, А.К. Ташатов

Қарши давлат университети Кучабог 17, 180003, Қарши, Ўзбекистон

Ушбу ишда Ni^+ ионларини Si юзасига имплантация қилиш ва кейинги қиздириш усули билан Si нинг юза ости қатламида 15-25 нм чуқурликда NiSi_2 нинг нанокристалл фазалари ва қатлами ҳосил қилинган. Ионлар дозаси $D=8 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ бўлганда Si/ NiSi_2 /Si туридаги нанокатламли гетероструктураси ҳосил бўлган. Биринчи марта Si нинг юза қатламида ҳосил қилинган NiSi_2 нанокристал фазаларининг ва қатламларининг зона кенгликлари аниқланади. Оже-электрон спектроскопия, растрли электрон ва атом кучланишли микроскопия усуллари ёрдамида Si юзасида Ni ни ўтқизиш ва кейинги қиздириш жарайнида NiSi_2 нинг эпитаксияси қатламларининг шаклланиши ўрганилди. Қатламнинг қалинлиги $h < 150 \text{ Å}$ бўлганда NiSi_2 нинг оролчали ўсиши аниқланди. NiSi_2 оролчаларининг ва пленкаларининг тақиқланган зона кенглиги бир-биридан фарқ қилмаслиги ва $\sim 0.6 \text{ эВ}$ га тенглиги аниқланди аммо уларнинг ρ бир неча даражада фарқ қилиши аниқланди.

Калит сўзлар: нанокатлам NiSi_2 , гетероструктура, юза структураси, Оже-электрон спектроскопия, зона кенгликлари, растрли электрон ва атом кучланишли микроскопия

Оптимизация процессов газофазного получения кремниевых и кремний-германиевых пленок

Б.М. Абдурахманов*, С.Р. Бойко, Х.Б. Ашуров, Ш.К. Кучканов

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А.Арифова АН РУз, ул. Дормон йули, 33, 100125, Ташкент, Узбекистан

Получена 01.04.2021

* Corresponding author: e-mail bogarab@mfil.ru, Phone: : +998-97-744-40-79

Одним из важнейших технологических параметров при газофазном получении эпитаксиальных кремниевых Si/Si или гетероструктур типа Si-Ge/Si является содержание галогенида, осаждаемого из газовой фазы полупроводника в парогазовую смесь с водородом. В работе предложена новая методика расчета концентрации тетрахлорида кремния или любого легирующего галогенида в составе парогазовой смеси. Эта методика даёт более точное совпадение с результатами прямых измерений содержания тетрахлорида кремния, проведённых различными методами. Использование новой методики расчёта позволяет снизить уровень брака на производстве и повысить однородность параметров наращиваемых слоёв по задаваемым толщине и удельному сопротивлению как внутри, так и между партиями изготавливаемых структур.

Ключевые слова: осаждение из газовой фазы, давление паров, концентрация тетрахлорида кремния, газовый поток, давление в реакторе и в испарителе, температура испарителя, однородность параметров наращиваемых слоёв.

One of the most important technological parameters in the gas-phase preparation of epitaxial silicon Si/Si or heterostructures of the Si-Ge/Si type is the halogenide content in semiconductor deposited from the gas phase into a vapor-gas mixture with hydrogen. The paper proposes a new method for calculating the concentration of silicon tetrachloride or any alloying halide in the composition of the vapor-gas mixture. This technique gives a much more accurate agreement with the results of direct measurements of the content of silicon tetrachloride, carried out by various methods. The use of a new calculation method allows to reduce the level of rejects in production and to increase the uniformity of the parameters of the layers being built up according to the specified thickness and resistivity both within and between batches of manufactured structures.

Keywords: vapor deposition, vapor pressure, silicon tetrachloride concentration, gas flow, pressure in the reactor and in the evaporator, evaporator temperature, uniformity of the parameters of the layers being grown

<https://doi.org/10.52304/v23i2.242>

I. Введение

Осаждение материалов из газовой фазы в процессах водородного восстановления их галогенидов является одним из самых распространённых на практике способов получения кремния, германия, бора, а также ряда металлов, находящихся применение в электронной технике,

как напрямую, так и в качестве легирующих компонентов для пленок Si и Ge, а также пленок в гетероэпитаксиальных структурах, пленки и подложки в которых выполнены из различных полупроводниковых материалов. Одной из разновидностей таких структур являются

эпитаксиальные слои твёрдых растворов кремний-германий, осажденные на кремниевые подложки (ЭСТР Si-Ge/Si), содержащие как одинаковую по толщине плёнки концентрацию Ge, так и варизонные, концентрация германия в которых возрастает к свободной поверхности пленки [1, 2]. Необходимо отметить, что процесс водородного восстановления применяется как для изготовления массивных кристаллов, н-р, поликристаллического кремния-сырца [3], так и для получения разнообразных пленочных структур [4]. Наиболее распространены кремниевые однослойные эпитаксиальные структуры (КОЭС) и кремниевые структуры с диэлектрической изоляцией (КСДИ), являющиеся основным полуфабрикатом для производства изделий микроэлектроники.

Для управляемого получения Si-сырца, КОЭС, КСДИ или гетероструктур с заданными электрофизическими характеристиками необходимо обеспечить точное задание и поддержание в течение всего технологического цикла величины основных параметров операции осаждения кремния из газовой фазы, включая температуру поверхности осаждения, расход или линейную скорость перемещения парогазовой смеси (ПГС) вдоль поверхности осаждения и содержание в ней

галогенидов кремния, наиболее применимыми из которых являются трихлорсилан (SiHCl_3) и тетрахлорид кремния (SiCl_4) [5, 6]. Столь же важное значение имеет правильное задание концентрации реагентов в парогазовой смеси при получении ЭСТР Si-Ge/Si [7, 8].

II. Описание объекта и методов исследования

В работе приведены данные о новой методике расчета состава парогазовой смеси (ПГС), кинетике основных операций получения КОЭС и КСДИ в диапазоне варьирования исходных параметров процесса, перекрывающем обычно применяемые на практике режимы. На рис. 1 приведена упрощенная газовая схема установки для получения КОЭС, КСДИ или гетероструктур Si-Ge/Si. Видно, что поступающая в реактор ПГС формируется в системе с испарителями барботажного типа, термостатируемыми при заданной температуре, через которые пропускается несущий газ водород, а расход водорода через каждый испаритель и его расход в байпасной, то есть разбавляющей линии, обычно определяют с помощью поплавочных ротаметров.

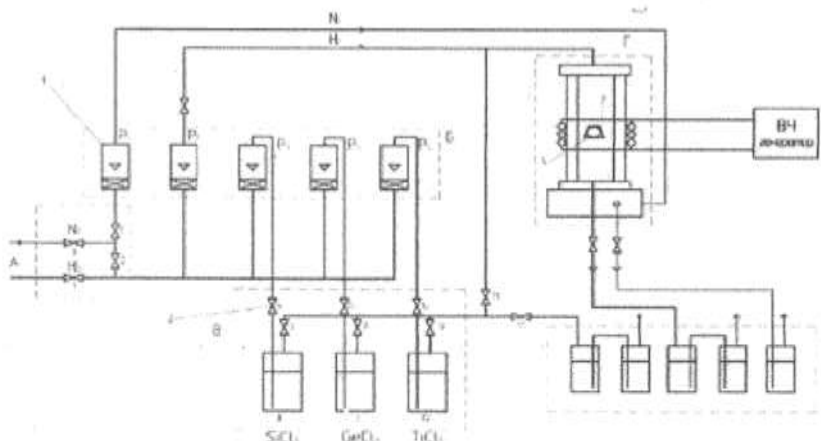


Рисунок 1. Схема установки наращивания эпитаксиальных слоев кремния и ЭСТР Si-Ge при легировании наращиваемых слоев примесью титана. Блоки: А – газораспределительный; Б – ротаметров, В – испарители, Г – реакторный, Д – сброс, масляные затворы на скруббер.

Содержание того или иного компонента в ПГС для системы с несколькими испарителями (рис. 1), частным случаем которого является выражение для концентрации отдельного компонента, н-р SiCl_4 , и одного испарителя, на

практике обычно рассчитывают с использованием формулы Амрона [9]:

$$C = \frac{P_m f}{(P - P_m)(F + f)}, \quad (1)$$

где P_m – давление насыщенного пара тетрагидрида кремния при заданной температуре испарителя; P – давление в системе; F – разбавляющий поток газа-носителя; f – поток газа-носителя через испаритель.

На практике используют и другое выражение, также полученное Амроном,

$$C = \frac{P_m f}{\{F(P - P_m) + fP\}}. \quad (2)$$

Из анализа выражения (1) следует, что при $P = P_m$ а это легко достигается на практике для SiCl_4 и SiHCl_3 , имеющих сильную зависимость давления паров от температуры, их концентрация в ПГС становится равной бесконечности ($C = \infty$). Согласно (2) в этом случае $C = 1$ вне зависимости от соотношения и величины потоков газа-носителя через испаритель и в байпасной линии, а также суммарного потока водорода в реактор.

III. Новая методика расчета и ее экспериментальная проверка

Нетрудно видеть, что результат расчета по [9] в обоих случаях не имеет физического смысла. Амрон [9] проводил расчет по каждому испарителю из предположения о замкнутом объеме, в то время как любое оборудование для осаждения из газовой фазы представляет собой открытую проточную систему, что хорошо видно на схеме рис. 1, согласно которой ПГС формируется в блоке испарителей, проходит реакторный блок, где из нее в результате водородного восстановления выделяют часть искомого полупроводника или легирующего компонента, а затем остатки и газообразные продукты реакции в виде HCl , H_2 , SiHCl_3 , SiCl_2 , SiCl_4 и т.д. пропускаются через блок сброса (Д) на скруббер на нейтрализацию и далее на дожигание водорода.

В частности, при выводе выражения (2) в [9] принято, что поток газа-носителя через испаритель равен

$$f = f_0 \frac{kT}{(P - P_m)},$$

где f_0 – поток газа по данным ротаметра; T – температура в системе, $K = P_T/T_T$, где P_T , T_T – давление и температура при тарировке ротаметра.

Такого в проточной системе быть не может. Поток газа-носителя через испаритель – это и есть собственно поток, измеряемый ротаметром.

Проведем более строгий расчет состава ПГС и сделаем это с учетом реального избыточного давления в испарителе, возникающего вследствие сопротивления газовых коммуникаций на пути из испарителя к реактору и от реактора к скрубберу, как это впервые было предложено в [10].

Рассмотрим систему с n параллельно включенными испарителями и j компонентами (аналог варианта, приведенного на рис. 1). Сделаем следующие допущения:

- в системе справедливы законы идеального газа;
- жидкости в испарителях полностью взаимно растворены;
- насыщение H_2 компонентами происходит в полном соответствии с их равновесным парциальным давлением.

В такой системе разбавляющий поток в реактор равен

$$F_0' = F_0 \frac{P_{p0}}{T_0} \frac{T}{P},$$

где F_0 – поток по данным ротаметра, $\text{м}^3/\text{с}$; P_{p0} – давление в ротаметра, $\text{н}/\text{м}^2$; P – давление в реакторе, $\text{н}/\text{м}^2$; T_0 – температура H_2 на входе в систему, К ; T – температура H_2 в реакторе, К . Поток H_2 в i -тый испаритель в этих условиях будет равен

$$f_i' = f_i \frac{P_{pi}}{T_0} \frac{T_i}{P_i}, \quad (3)$$

где f_i – поток по данным ротаметра $\text{м}^3/\text{с}$; P_{pi} – давление в ротаметра, $\text{н}/\text{м}^2$; T_0 , P_i – температура и давление в испарителе. Поток H_2 из i -того испарителя в реактор равен

$$f_i'' = f_i' \frac{P_{pi}}{T_0} \frac{T}{P}. \quad (3')$$

Общий поток H_2 в реактор равен

$$F_i = F_0' + \sum_{i=1}^n f_i'',$$

т.е.

$$F = \frac{T}{PT_0} \left(P_{p0} F_0 + \sum_{i=1}^n f_i P_{pi} \right).$$

Для одного испарителя по закону Бойля-Мариотта можно записать соотношение:

$$f_{\text{вых}} P_i = f_i' \left[P_i + \sum_{j=1}^m (x_j P_j)_i \right], \quad (4)$$

где $f_{\text{вых}}$ – поток ПГС из испарителя, м³/с; $(x_j)_i$ – концентрация j -той жидкости в i -том испарителе; P_j – давление насыщенных паров этой жидкости при T_i ; m – число жидких компонентов в системе. Из (4) следует

$$f_{\text{вых}} = f_i + \frac{f_i'}{P_i} \sum_{j=1}^m (x_j P_j)_i. \quad (5)$$

Второе слагаемое в (5) отражает суммарный поток пара жидких компонентов из испарителя. Поток j -го компонента из i -го испарителя, следовательно, равен

$$(f_j)_i = f_i' \frac{(x_j P_j)_i}{P_i},$$

а на входе в реактор с учетом (3)

$$(f_j)_i = f_i \frac{P_{pi} T}{T_0 P_i} (x_j P_j)_i.$$

Полный поток пара j -го компонента в реактор

$$f_j = \sum_{i=1}^n (f_j)_i, \quad f_j = \frac{T}{T_0 P} \sum_{i=1}^n f_i \frac{P_{pi}}{P_i} (x_j P_j)_i.$$

Суммарный поток пара в реактор $f = \sum_{j=1}^m f_j$

$$f = \frac{T}{T_0 P} \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n f_i \frac{P_{pi}}{P_i} (x_j P_j)_i.$$

Отношение потока пара j -го компонента к общему потоку Н₂ определится как $\Pi_j = f_j / F$

$$\Pi_j = \frac{\sum_{i=1}^n f_i \frac{P_{pi}}{P_i} (x_j P_j)_i}{F_0 P_0 + \sum_{i=1}^n f_i P_{pi}}$$

Мольная доля j -го компонента в парогазовой смеси в реакторе определяется отношением

$$M_j = \frac{\sum_{i=1}^n f_i \frac{P_{pi}}{P_i} (x_j P_j)_i}{F_0 P_0 + \sum_{i=1}^n f_i P_{pi} + \sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n f_i \frac{P_{pi}}{P_i} (x_j P_j)_i}. \quad (6)$$

Рассмотрим наиболее интересные для практики частные случаи.

1. Система с одним испарителем и одним компонентом. Мольная доля компонента в ПГС описывается выражением

$$M = \frac{f P_m}{F_0 P_0 + f P_u + f P_m}, \quad (7,1)$$

где F_0 , f – соответственно потоки Н₂ разбавляющий и в испаритель; P_0 , P_u – давление в линии разбавляющего потока (практически давление в реакторе, в испарителе, P_m – давление компонента насыщенного пара при данной температуре испарителя.

2. Система с двумя параллельно включенными испарителями, заполненными одним и тем же компонентом и термостатированными при одинаковой температуре.

Концентрация равна

$$M = \frac{(f_1 + f_2) P_m}{F_0 P_0 + f_1 (P_1 + P_m) + f_2 (P_2 + P_m)}, \quad (7,2)$$

где f_1 , f_2 , P_1 , P_2 – потоки и давления соответственно в первом и втором испарителях.

3. Система с двумя испарителями: в первом из них один компонент, во втором, наряду с основным, находится легирующий компонент в концентрации X . Мольная доля основного компонента равна

$$M_1 = \frac{f_1 P_{11} + f_2 P_{12} (1 - X)}{F_0 P_0 + f_1 (P_1 + P_{11}) + f_2 [P_2 + P_{12} (1 - X) + P_{22} X]}, \quad (7,3)$$

где P_1 , P_2 – давление в 1-ом и 2-ом испарителях; P_{11} , P_{12} – давление насыщенного пара основного компонента соответственно в 1-ом и 2-ом испарителях; P_{22} – давление насыщенного пара легирующего компонента, добавленного во 2-ой испаритель. Мольная доля легирующего компонента равна

$$M_2 = \frac{f_2 P_{22} X}{F_0 P_0 + f_1 (P_1 + P_{11}) + f_2 [P_2 + P_{12} (1 - X) + P_{22} X]}. \quad (7,4)$$

Расчетные кривые по Амрону (ур-е 2) и предложенной нами методике были сопоставлены с результатами прямых измерений концентрации тетрахлорида кремния в ПГС, проведенных методами вымораживания паров SiCl₄, пропускаемых за определенный промежу-

ток времени, с последующим взвешиванием испарителя SiCl_4 непосредственно в ходе эксплуатации при постоянной температуре и постоянном расходе водорода через него по изменению уровня жидкого SiCl_4 в испарителе в ходе его эксплуатации, а также с помощью специально разработанного прибора-анализатора состава ПГС [11].

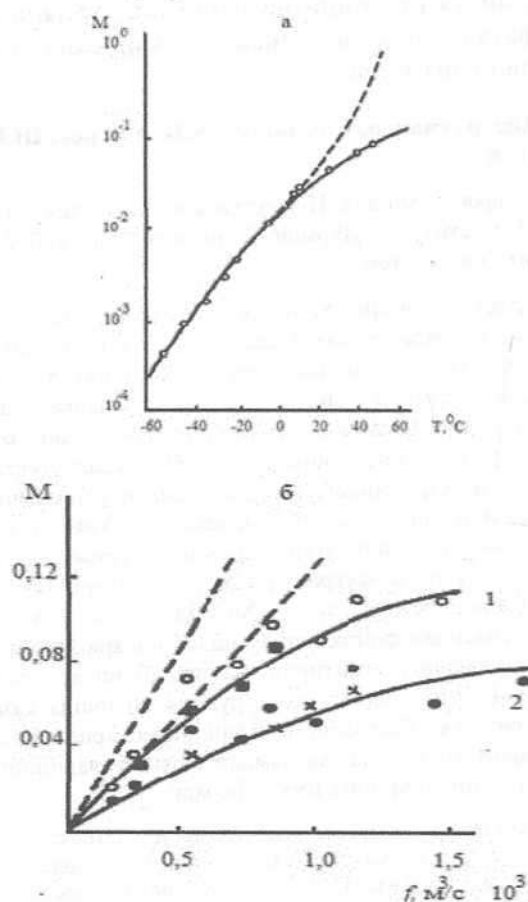


Рисунок 2. Зависимости концентрации тетрахлорида кремния в ПГС (мольн. доли) от температуры (верхний рисунок) испарителя при суммарном потоке H_2 $6.7 \times 10^{-5} \text{ м}^3/\text{с}$ и потоке через испаритель $0.75 \times 10^{-5} \text{ м}^3/\text{с}$ и от расхода водорода через испаритель (нижний рисунок), термостатированный при 295 К при суммарном потоке водорода $1.7 \times 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$ (1) и $2.5 \times 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$. Пунктиром показан расчёт по Амрону [9]; сплошные линии – расчёт по предлагаемой методике (7); «белые» кружки – вымораживание SiCl_4 ; черные квадраты – взвешивание испарителя; черные кружки – измерение состава ПГС с помощью прибора-анализатора SiCl_4 в ПГС по теплопроводности [11]; крестики – оценка расхода SiCl_4 по изменению уровня жидкого тетрахлорида кремния.

Результаты сопоставления приведены на рис. 2. Видно, что расчет по формуле (7) (сплошные кривые) близок к эксперименту, в то время как расчет по (2) сильно противоречит экспериментальным данным. Расхождение расчета по (2) с экспериментом резко возрастает при повышении температуры испарителя выше 0°C . То есть в диапазоне температур испарителя, близких к комнатной, и вследствие относительной простоты ее обеспечения и поддержания, наиболее употребляемая на практике грубая ошибка в оценке состава ПГС по (2) неизбежна. Это особенно хорошо видно из сопоставления расчетных и экспериментальных данных, полученных при варьировании расхода водорода через испаритель, термостатированный при комнатной температуре (рис. 2). Расчет состава ПГС по предлагаемой нами методике, наоборот, дает хорошую сходимость с экспериментом, поскольку впервые учитывает реальные избыточные давления в реакторе и испарителе.

Таким образом, новая методика впервые учитывает реальные избыточные давления в испарителе и в реакторе. Последнее обстоятельство влияет не только на правильность задания и поддержания концентрации тетрахлорида кремния в ПГС, но и на кинетику роста слоев и должно рассматриваться как один из основных параметров процесса осаждения.

IV. Заключение

Использование расчета по (7) позволяет изготавливать КОЭС или гетероэпитаксиальные структуры Si-Ge/Si с заданными свойствами, а также в производственных условиях получить существенный экономический эффект за счёт повышения однородности параметров наращиваемых слоев в этих структурах. Важно, что однородность параметров обеспечивается и между партиями, получаемых как на одной, так и на нескольких установках и, тем самым, достигается снижение уровня брака в промышленном производстве КОЭС, КСДИ Si-сырца и другой продукции, изготовление которой ведется осаждением из газовой фазы.

Метаданнелар

Optimization of the processes of gas-phase production of silicon and silicon-germanium films

B.M. Abdurakhmanov, S.P. Boyko, Kh.B. Ashurov, Sh.K. Kuchkanov

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U.A. Arifov, Durmon yuli str., 33, 100125, Tashkent, Uzbekistan

One of the most important technological parameters in the gas-phase preparation of epitaxial silicon Si/Si or heterostructures of the Si-Ge/Si type is the halogenide content in semiconductor deposited from the gas phase into a vapor-gas mixture with hydrogen. The paper proposes a new method for calculating the concentration of silicon tetrachloride or any alloying halide in the composition of the vapor-gas mixture. This technique gives a much more accurate agreement with the results of direct measurements of the content of silicon tetrachloride, carried out by various methods. The use of a new calculation method allows to reduce the level of rejects in production and to increase the uniformity of the parameters of the layers being built up according to the specified thickness and resistivity both within and between batches of manufactured structures.

Keywords: vapor deposition, vapor pressure, silicon tetrachloride concentration, gas flow, pressure in the reactor and in the evaporator, evaporator temperature, uniformity of the parameters of the layers being grown.

Литература (References)

- [1] K.L. Lyutovich, J.T. Abdurakhmanov, L.L. Lukashevich, I.V. Drachuk. *Uzbek Journal of Physics* No.5-6, 31 (1997).
- [2] J.T. Abdurakhmanov, I.V. Drachuk, K.L. Lyutovich. *Uzbek Journal of Physics* No.5-6, 74 (1997).
- [3] A.B. Naumov, S.I. Plekhanov. IX Mejdunarodnoya konferentsiya po aktualnym problemam fiziki, materialovedeniya, texnologii i diagnostiki kremniya, nanorazmernykh struktur i priborov na ego osnove («Kremniy-2012») (Sankt-Peterburg, s. 12, 2012).
- [4] V.V. Kharchenko. *Voprosy opitaksial'nogo osajdeniya kremniya* (Tashkent, 1976).
- [5] A.B. Naumov, S.I. Plekhanov. *Tsvetnaya metallurgiya* No.6, 70-76 (2013).
- [6] A.B. Naumov. *Rynok polikristallicheskogo kremniya: sostoyaniye i perspektivi*. *Elektronika* No.9, 1-8 (2015).
- [7] Sh.K. Kuchkanov, Kh.B. Ashurov. *Tech. Phys. Lett.* 44, No.4, 334 (2018).
- [8] Kh.B. Ashurov, B.M. Abdurakhmanov, Sh.K. Kuchkanov, S.J. Nigmatov, S.E. Maksimov. *Uzbek Journal of Physics* 15, No.1-2, 83-87 (2013).
- [9] J. Amron. *Electrochem. Tech.* 2, 327 (1964).
- [10] B.M. Abdurakhmanov, S.R. Boyko, A.S. Kuznetsov, I.F. Kustov, M.S. Saidov, V.V. Kharchenko. *Informatsionnoe soobsheniye* No.304 (Izdatelstvo «Fan», Tashkent 1983).

[11] B.M. Abdurakhmanov, V.V. Kharchenko, V.P. Pashkudenko. *Pribor dlya opredeleniya soderjaniya tetraxlorida kremniya v vodorode*. *Avtorskoe svidetelstvo SSSR* №387263..

[12] B.M. Abdurakhmanov, Kh.B. Ashurov, M.Sh. Qurbonov. *Ximiko-metallurgicheskiy heredel kremnezema v monosilanolanovoe syr'e dlya solnechnoy energetiki i nanoelektroniki*. *Monografiya* (Izdatelstvo «Navroz», Tashkent, 2018).

Кремний ва кремний-германий плёнчаларини газ фазали ишлаб чиқариш жараёнарини оптималлаштириш

Б.М. Абдурахманов, С.П. Бойко, Х.Б. Ашуров, Ш.К. Кучканов

У.А. Орифов номидаги Ион-плазма ва лазер технологиялари институти, Дўрмон йўли кўч., 33, 100125, Тошкент, Ўзбекистон

Эпитаксиал кремний Si/Si ёки Si-Ge/Si типдаги гетероструктураларни газ фазали ишлаб чиқаришдаги энг муҳим технологик параметрлардан бири бу газ фазасидан водород билан буғ-газ аралашмасида ўстирилган яримўтказгичли галогенит таркибидир. Бу ишда кремний тетраҳлорид ёки буғ аралашмаси таркибдаги ҳар қандай галоген концентрациясини ҳисоблашнинг янги усули таклиф қилинган. Ушбу усул билан амалга оширилган кремний тетраҳлорид таркибини тўғридан-тўғри ўлчаш натижалари жуда катта аниқликка эга. Ҳисоблашнинг янги методологиясидан фойдаланиш, ишлаб чиқаришда рад этиш даражасини пасайтириш ва ишлаб чиқарилган қалинлик ва қаршилигига конструкциялар ичида ҳам улар орасида ҳам белгиланган қалинлик ва қаршиликка қараб барпо этиладиган қатламлар параметрларининг бир-ҳиллигини оширишга имкон беради.

Калит сўзлар: газ фазасидан ёғилиши, тетрахлорид кремнийнинг концентрацияси, газ оқими, реакторда ва буғланиш мосламасидаги босим, буғланиш ҳарорати, ўстирилаётган қатлам параметрларининг бир хиллиги.

Разработка гибких органических солнечных элементов на основе тиено[2,3-f]бензофурана и тиенопирролдиона

Э.А. Захидов¹, И.И. Тажибаев^{1*}, Л.Р. Нурумбетова¹, Ш.К. Нематов², В.О. Кувондинов¹, И.Р. Бойназаров¹, Ф.М. Рузиев¹

¹Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Дурмон йули 33, 100125, Ташкент, Узбекистан

²Ташкентский государственный технический университет, ул. Университетская 4, 100174, Ташкент, Узбекистан

Получена 27.08.2021

* Corresponding author: e-mail lihom.tajiboyev@gmail.com Phone: +998 97 730 88 79

В настоящей работе мы разработали органический солнечный элемент из нового синтезированного полимера PTBFD на основе двумерного сопряженного полимера донорно-акцепторного типа и исследовали его характеристики сравнительно с традиционным материалом PBDTD. Оказалось, что оба полимера имеют схожие оптические свойства. Исследование XRD показало, что PTBFD имеет более сильную π - π связь, чем PBDTD, что подразумевает плотную укладку полимерных цепей. Фотовольтаические свойства были исследованы в различных комбинациях при одинаковых условиях изготовления. Органический солнечный элемент на основе PTBFD показал 4.33% эффективности преобразования энергии при напряжении холостого хода (V_{oc}) до 1.09 В, что привело к улучшению эффективности на 32% по сравнению с PBDTD.

Ключевые слова: Органические солнечные элементы, тиено[2,3-f]бензофуран, сопряженный полимер, спектры поглощения, напряжение холостого хода.

In this work, we have developed an organic solar cell from a new synthesized polymer PTBFD based on a two-dimensional conjugated polymer of the donor-acceptor type and comparatively investigated its characteristics with the traditional PBDTD material. Both polymers showed similar optical properties. XRD research showed that PTBFD has a more strong π - π bond than PBDTD, which implies more compact packing of polymer chains. The photovoltaic properties were investigated in various combinations under the same manufacturing conditions. The organic solar cell based on PTBFD showed 4.33% energy conversion efficiency at open circuit voltage (V_{oc}) up to 1.09 V, resulting in a 32% improvement to comparison with PBDTD.

Keywords: Organic solar cells, thieno[2,3-f]benzofuran, conjugated polymer, absorption spectra, open circuit voltage.

<https://doi.org/10.52304/v23i2.243>

1. Введение

В последние годы органические солнечные элементы (ОСЭ), изготавливаемые в растворе с объемным гетеропереходом (ОГП), привлекли большое внимание из-за присущих им выгодных свойств, таких как низкая стоимость, легкость, гибкость, возможность производства с помощью технологии печати [1]. На сегодняшний день в

однопереходных ОСЭ на основе фуллерена эффективность преобразования энергии (ЭПЭ) превышает 11% [2, 3]. В ОСЭ ОГП активный слой всегда включает сопряженные полимеры и производное фуллерена (такие как метиловый эфир [6,6]-фенил- C_{61} -масляной кислоты, PC₆₁BM или метиловый эфир [6,6]-фенил- C_{71} -масляной кислоты, PC₇₁BM) [4, 5]. Наряду с разработкой произ-

водных фуллерена, новые высокоэффективные сопряженные полимеры также необходимо развивать для коммерческих целей в будущем [6]. Что касается новых сопряженных полимеров, наиболее успешной стратегией их разработки является использование донорно-акцепторной сополимеризации. Основная цепь сопряженного полимера состоит из чередующихся единиц, богатых электронами, и единиц, не содержащих электроны вдоль основной цепи полимера [7]. Это связано с тем, что сопряженные полимеры донор-акцептор (Д-А) обладают большими преимуществами:

- 1) наличием широкого спектра поглощения, наряду с высоким коэффициентом экстинкции, что позволяет улавливать больше солнечных фотонов;
- 2) подходящими и легко настраиваемыми уровнями молекулярной энергии, что приводит к большему выбору подходящих акцепторов;
- 3) повышенной подвижностью заряда, что облегчает разделение и транспортировку зарядов [8].

При разработке высокоэффективных полимеров, сопряженных с Д-А, полимеры на основе тиено[2,3-ф]бензотиофена (BDT) вызвали большой интерес исследователей. В 2008 году блок BDT был впервые синтезирован Хоу и применен для разработки ОСЭ [9]. После этого ряд полимеров на основе BDT был синтезирован и исследован для создания ОСЭ многими исследовательскими группами. Например, звенья BDT были сополимеризованы с изоиндиго [10], хиноксалином [11], тиено[3,4-б]тиофеном [12] и другими акцепторными звеньями [13]. Среди этих полимеров полимеры на основе BDT с двумерными (2D) конъюгированными боковыми цепями обладали лучшими характеристиками, чем полимеры 1D на основе BDT, в отношении протяженности, конъюгирования, по всему полимеру [14]. Как аналог BDT, тиено[2,3-ф]бензофуран (TBF) в качестве нового строительного блока имеет одно тиофеновое кольцо звена BDT, замененное фурановым кольцом. Ожидается, что TBF на основе полимеров будет иметь более глубокий энергетический уровень НОМО для более сильной электроотрицательности атома кислорода по сравнению с атомом серы, и это будет полезно для получения высокого V_{oc} [15].

В то же время меньший радиус фурана также может сделать основную цепь TBF более плоской [16]. Эти характеристики делают блок TBF много-

обещающим для создания эффективных полимеров конъюгации Д-А.

Зоу и др. сообщили о новом 2D-полимере PTBFT на основе алкилтиенил-замещенного тиено [2,3-ф]бензофурана (TBF) и бензотиадиазола, который показывает более высокую ЭПЭ (6.4% с V_{oc} 0.8 В), намного выше, чем его аналог полимера PBDTT (ЭПЭ 4.9% с V_{oc} 0.75 В) [17]. В то же время о полимерах с высоким напряжением, превышающим 1 В при изготовлении устройств, до сих пор сообщалось редко. Эти характеристики делают блок TBF многообещающим для создания эффективных полимеров конъюгации Д-А. Однако в настоящее время исследования полимеров на основе TBF все еще далеко отстают от полимеров BDT. Учитывая преимущества блока TBF, необходимо разрабатывать новые полимеры на основе TBF и исследовать их фотоэлектрические свойства с целью достижения более высоких характеристик при высоком напряжении и обогащении полимеров типа TBF.

II. Описание объекта и методов исследования

Все реагенты были приобретены из коммерческих источников без дополнительной очистки. Все новые полимеры синтезировали в Институте биоэнергетики и технологии биопреципсов КНР. 2-(2-Этилгексил) тиофен1 синтезировали согласно литературным данным [18], тиено[2,3-ф] бензофуран-4,8-дион2 получали по описанной методике в [17]. M1 синтезировали согласно данным [19], TPD получали по методике [20]. Спектры UV-Vis изучали на спектрофотометре Agilent Cary 60. Спектры ФЛ снимали на спектрофотометре Ocean Optics H2000+. Рентгеновскую дифракцию (XRD) изучали при комнатной температуре на спектрометре Bruker D8 ADVANCE с детектором общей площади. Толщину активного слоя образцов измеряли с помощью профилометра Veeco Dektak 150.

II.1 Изготовление и характеристики устройства

ОСЭ были изготовлены следующим образом: стеклянные подложки, покрытые ITO (15 Ом/см^2), были очищены детергентом, деионизированной водой, ацетоном и изопропиловым спиртом. Тонкий слой (около 40 нм) PEDOT: PSS (Baytron® P4083, фильтрация 0.45 мкм) сначала нанесли центрифугированием на предварительно очищенные стеклянные подложки с покрытием ITO при

3000 об/мин, затем отожгли при 140°C в течение 10 мин при обычных условиях. Смешанный раствор полимер PC₇₁BM растворяли в хлорбензоле (ХБ) с массовым соотношением 1:1.5 и фильтровали через фильтр из политетрафторэтилена с порами 0.2 мкм. Смешанный раствор перемешивали 10 ч при температуре окружающей среды и 2 ч при 80°C. Затем активный слой наносили центрифугированием на стекло с покрытием ИТО, модифицированным PEDOT:PSS, и отжигали на горячей плите при 100°C в течение 20 мин, что в итоге давало активный слой толщиной 100–140 нм в зависимости от разной скорости вращения. Оптимальная толщина активного слоя составляла около 135 нм. После этого раствор 0.2 мг/мл PFN в метаноле наносили методом центрифугирования на активный слой, который имел толщину около 5 нм. На заключительном этапе, выдержав подложки в среде высоким вакуумом ($<6 \times 10^{-7}$ Торр), термически напыляли слой алюминия (100 нм) на активный слой через теневые маски для определения активной области устройства. Активная площадь прибора, определяемая теневой маской, составляла 0.1 см². Характеристики плотности тока и напряжения (J - V) регистрировали с помощью измерителя Keithley 2420 при стандартном облучении 100 мВт/см² (AM 1.5 G) солнечным стимулятором Newport. Интенсивность света калибровали с помощью стандартного кремниевое солнечного элемента.

III. Результаты и обсуждение

III.1. Оптические и электрохимические свойства

Спектры поглощения UV PTBFD и PBDDT, в виде тонкой пленки, измеренные в хлороформе, показаны на рис. 1. Как PTBFD, так и PBDDT показали широкое и интенсивное поглощение в диапазоне видимого света 400–650 нм. PTBFD и PBDDT в основном обладали двумя полосами поглощения как в растворенном, так и в пленочном состояниях. А высокоэнергетическая полоса от 300 до 400 нм возникла из-за локализованного π - π^* перехода. Низкоэнергетическая полоса в диапазоне 400–650 нм может быть приписана внутримолекулярному переносу заряда между электрон-богатым донорным TBF (BDT) и электрон-дефицитным акцепторным TPD, которые аналогичны другим сополимерам D-A [21, 22]. Ширина оптической запрещенной зоны (E_{gopt}) оценивается

по началу положения поглощения в пленках. Оптические значения ширины запрещенной зоны 1.83 эВ и 1.85 эВ рассчитаны соответственно для PTBFD и PBDDT.

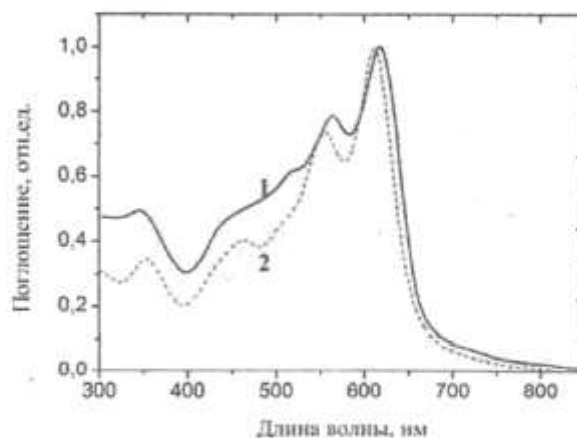


Рисунок 1. UV-спектры PTBFD (1) и PBDDT (2).

В табл. 1 приведены оптические данные, включая длину волны основного пика поглощения, длину волны края поглощения и оптические запрещенные зоны (E_{gopt}) для PTBFD и PBDDT.

Таблица 1. Оптические свойства PTBFD и PBDDT.

Оптические свойства	PTBFD	PBDDT
λ_{max} (нм)	619	612
$\lambda_{\text{края}}$ (нм)	678	670
E_{gopt} (эВ)	1.83	1.85

Уровни энергии HOMO и LUMO для PTBFD и PBDDT могут быть рассчитаны с использованием уравнений, в которых ферроцен использовался в качестве внутреннего стандарта [24].

$$E_{\text{HOMO}} = -e(V_{\text{ок}} + 4.80 - V_{\text{ферро}}), \quad (1)$$

$$E_{\text{LUMO}} = -e(V_{\text{ред}} + 4.80 - V_{\text{ферро}}), \quad (2)$$

где $V_{\text{ферро}}$ – эталонный уровень энергии ферроцена, при измерениях он равен 0.21 В. Уровни энергии HOMO и LUMO для PTBFD были определены как –5.64 эВ, –3.66 эВ соответственно, а уровни энергии HOMO и LUMO для PBDDT были рассчитаны как –5.54 эВ, –3.67 эВ соответственно.

Несоответствие между электрохимической и оптической шириной запрещенной зоны может быть результатом пограничного барьера между

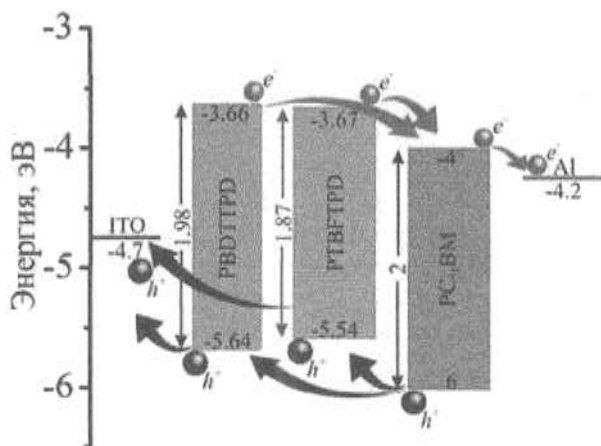


Рисунок 2. Диаграмма уровней энергии PTBFD и PBDTD.

полимерной пленкой и поверхностью электрода [25]. Как показано на рис. 2, большая разница между уровнями энергии HOMO для PTBFD (или PBDTD) и PC₇₁BM [23] будет обеспечивать эффективный перенос/диссоциацию заряда [26]. Хорошо известно, что V_{oc} почти прямо пропорционально разнице между уровнем HOMO полимера и уровнем LUMO PC₇₁BM [27], поэтому более глубокий уровень энергии HOMO PTBFD, чем у PBDTD, будет способствовать более высокому V_{oc} в полученных солнечных элементах.

III.2. Рентгеновская дифракция

XRD рентгеновских лучей использовали для исследования поведения полимерных цепей в стопке. Диаграммы рентгеновской дифракции скользящего падения PTBFD и PBDTD в пленке показаны на рис. 3.

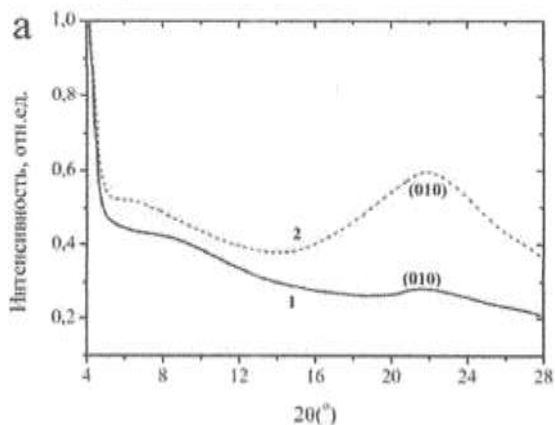


Рисунок 3. Рентгенограммы исходных пленок PTBFD и PBDTD.

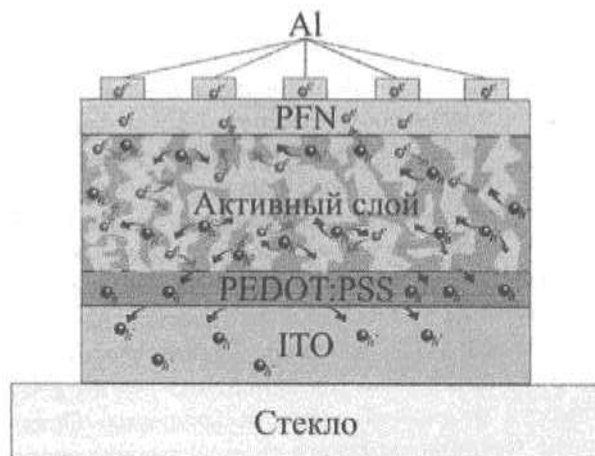


Рисунок 4. Конструкция устройства, изготовленного из обычного органического фотозлемента.

Как видно на рис. 3, PTBFD показывает сильное отражение при 22.5° из-за его плоскости (010), что соответствует π - π расстоянию 3.94 Å. В PBDTD однако наблюдалось более слабое отражение при 21.5° из-за его плоскости (010), что соответствует расстоянию упаковки π - π 4.14 Å. Более сильный пик отражения и меньшее расстояние p - p стэкинга в PTBFD указывают на то, что PTBFD имеет сильную тенденцию к кристаллизации и более плотную укладку цепей, которые являются благоприятными для переноса заряда [28].

III.3. Фотоэлектрические свойства

Чтобы исследовать фотоэлектрические характеристики PTBFD, объемные ОСЭ с гетеропереходом были изготовлены с использованием смеси PTBFD/PC₇₁BM в качестве активного слоя со структурой устройства ITO/PEDOT:PSS/активный слой/PFN/Al (рис. 4). Активный слой был нанесен центрифугированием из раствора в хлорбензоле. Al был выбран в качестве катода для сбора электронов с тонким слоем PFN, который является хорошо известным межфазным материалом для улучшения фотоэлектрических характеристик. Оптимизированное массовое соотношение PTBFD и PC₇₁BM составляло 1:1.5. Известно, что добавка к растворителю, н-р 1,8-диодоктана (ДИО), играет важную роль в определении рабочих характеристик устройства. В настоящей работе были изготовлены устройства PTBFD с различными ДИО. На рис. 5а показаны кривые вольтамперных характеристик для устройств PTBFD/PC₇₁BM при различных добавленных объемах ДИО. Обнаружено, что устройство PTBFD с

2 об.% ДИО дает $V_{oc} = 1.2$ В, $J_{sc} = 4.01$ мА/см² и FF 49.7%, в результате чего ЭПЭ составляет 2.03%. Когда ДИО был увеличен до 3 об.%, ЭПЭ был улучшен до 3.0% с помощью улучшенных J_{sc} и FF (см. таблицу 2). При дальнейшем увеличении количества ДИО было обнаружено снижение производительности устройства.

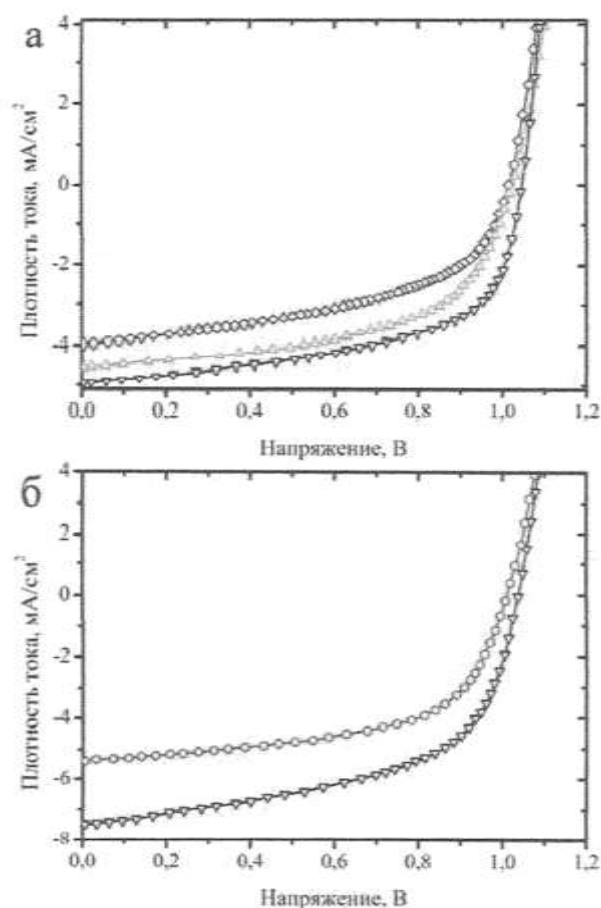


Рисунок 5. Вольтамперные характеристики фотоэлементов на основе PTBFD:PC₇₁BM и PBDTD:PC₇₁BM. а) PTBFD:PC₇₁BM при различных значениях ДИО (ромбики – при 2% ДИО, треугольники – при 4% ДИО, перевёрнутые треугольники – при 3% ДИО); б) при 3% ДИО с отжигом (кружки – PBDTD:PC₇₁BM, перевёрнутые треугольники – PTBFD:PC₇₁BM).

Однако при тех же условиях изготовления устройств только устройство на основе PBDTD показало ЭПЭ 2.78% с более низким J_{sc} .

Термический отжиг – эффективный способ улучшить характеристики устройства. Чтобы изучить влияние термической обработки на характеристики солнечных элементов, смешанная пленка PTBFD/PC₇₁BM была выдержана при разных

Таблица 2. Фотозлектрические параметры полимеров/PC₇₁BM, измеренные при освещении в смоделированных условиях AM 1.5G (100 мВт/см²).

Д/А	V_{oc} , В	J_{sc} , мА/см ²	FF, %	ЭПЭ (%)
PTBFD:PC ₇₁ BM ^a	1.04	4.96	58.2	3.00
PBDTD:PC ₇₁ BM ^a	1.02	4.53	59.9	2.78
PTBFD:PC ₇₁ BM ^b	1.09	7.51	52.9	4.33
PBDTD:PC ₇₁ BM ^b	1.02	5.53	58.3	3.29

температурах, в течение разного времени перед нанесением катода. Видно, что оптимизированные условия термической обработки составили 100°C в течение 30 минут. Фотовольтаические параметры устройства PTBFD/PC₇₁BM с термической обработкой, показанные на рис. 5б, свидетельствуют, что ЭПЭ устройства PTBFD/PC₇₁BM с улучшенными J_{sc} 7.51 мА/см², FF 52.9% и V_{oc} до 1.09 В увеличен до 4.33%, это на 44% лучше по сравнению с устройством без термической обработки. И это является одним из самых высоких значений V_{oc} в ОСЭ с одиночным объемным гетеропереходом. Однако в тех же оптимизированных условиях устройство PBDTD/PC₇₁BM дало только ЭПЭ 3.29% при $V_{oc} = 1.02$ В, $J_{sc} = 5.53$ мА/см² и FF 58.3% (см. табл. 2). Значительное повышение производительности устройства в PTBFD по сравнению с PBDTD, мы полагаем, связано с лучшей π - π связью в PTBFD, о чем свидетельствует измерение XRD, которая может обеспечить подходящую морфологию PC₇₁BM и лучший путь для переноса и сбора дырок. Наблюдаемое более высокое V_{oc} до 1.09 В в устройстве PTBFD/PC₇₁BM объясняется более низким уровнем энергии НОМО для PTBFD и ролью PFN.

IV. Заключение

Нами был разработан ОСЭ на основе сопряженных полимеров PTBFD и PBDTD. Оптические и электрохимические свойства, поведение молекулярной цепочки и фотозлектрические свойства были системно исследованы. Оба полимера показали сходные оптические свойства. PTBFD имел немного более узкую ширину запрещенной зоны, 1.83 эВ, в то время как ширина запрещенной зоны 1.85 эВ была определена для PBDTD. PTBFD показал более глубокий уровень энергии НОМО, 5.64 эВ, что на

0.10 эВ ниже, чем у PBDTD. Исследование XRD показало, что PTBFD имеет более близкий π - π стэкинг, чем PBDTD. Фотоэлектрические свойства были исследованы в различных условиях, был получен оптимизированный ЭПЭ 4.33% с V_{oc} до 1.09 В, что привело к улучшению эффективности на 32% по сравнению с устройством на основе PBDTD/PC₇₁BM при тех же условиях. Эти результаты указывают на многообещающие перспективы тиено[2,3-ф]бензофуранового звена для высокоэффективных полимерных солнечных элементов с высоким напряжением.

Метаданные

Development of flexible organic solar cells based on thieno[2,3-f]benzofuran and thienopyrroldione

E.A. Zakhidov¹, I.I. Tajibaev¹, A.A. Saparbaev¹, Sh.K. Nematov², V.O. Kuvondikov¹, I.R. Boynazarov¹, F.M. Ruziev¹

¹Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies of Uzbekistan Academy of Sciences, Durmon yuli str. 33, 100125, Tashkent, Uzbekistan

²Tashkent State Technical University, University str. 4, 100174, Tashkent, Uzbekistan

In this work, we have developed an organic solar cell from a new synthesized polymer PTBFD based on a two-dimensional conjugated polymer of the donor-acceptor type and comparatively investigated its characteristics with the traditional PBDTD material. Both polymers showed similar optical properties. XRD research showed that PTBFD has a more strong π - π bond than PBDTD, which implies more compact packing of polymer chains. The photovoltaic properties were investigated in various combinations under the same manufacturing conditions. The organic solar cell based on PTBFD showed 4.33% energy conversion efficiency at open circuit voltage (V_{oc}) up to 1.09 V, resulting in a 32% improvement to comparison with PBDTD.

Keywords: Organic solar cells, thieno[2,3-f]benzofuran, conjugated polymer, absorption spectra, open circuit voltage.

Литература

- [1] E. Zakhidov, M. Imomov, V. Quvondikov, S. Nematov, I. Tajibaev, A. Saparbaev, R. Yang. *Applied Physics A* **125**(11), 1-7 (2019).
- [2] V. Vohra, K. Kawashima, T. Kakara, T. Koganezawa, I. Osaka, K. Takimiya, H. Murata. *Nature Photonics* **9**(6), 403-408 (2015).
- [3] J. Zhao, Y. Li, G. Yang, K. Jiang, H. Lin, H. Ade, et al. *Nature Energy* **1**(2), 1-7 (2016).
- [4] H. Yao, R. Yu, T.J. Shin, H. Zhang, S. Zhang, B. Jang, J. Hou. *Advanced Energy Materials* **6**(15), 1600742 (2016).
- [5] S. Shi, J. Yuan, G. Ding, M. Ford, K. Lu, G. Shi, et al. *Advanced Functional Materials* **26**(31), 5669-5678 (2016).
- [6] J. Fan, Y. Zhang, C. Lang, M. Qiu, J. Song, R. Yang, et al. *Polymer* **82**, 228-237 (2016).
- [7] I. Osaka, M. Shimawaki, H. Mori, I. Doi, E. Miyazaki, T. Koganezawa, et al. *Journal of the American Chemical Society* **134**(7), 3498-3507 (2012).
- [8] J. Hou, M.H. Park, S. Zhang, Y. Yao, L.M. Chen, J.H. Li, et al. *Macromolecules* **41**(16), 6012-6018 (2008).
- [9] Y. Yang, R. Wu, X. Wang, X. Xu, Z. Li, K. Li, et al. *Chemical Communications* **50**(4), 439-441 (2014).
- [10] X. Xu, Y. Wu, J. Fang, Z. Li, Z. Wang, Y. Li, et al. *Chemistry-European Journal A* **20**(41), 13259-13271 (2014).
- [11] L. Huo, S. Zhang, X. Guo, F. Xu, Y. Li, et al. *Angewandte Chemie International Edition* **50**(41), 9697-9702 (2011).
- [12] T. Liu, X. Pan, X. Meng, Y. Liu, D. Wei, W. Ma, et al. *Advanced Materials* **29**(6), 1604251 (2017).
- [13] H. Yao, H. Zhang, L. Ye, W. Zhao, S. Zhang, et al. *ACS Applied Materials & Interfaces* **8**(6), 3575-3583 (2016).
- [14] X. Chen, B. Liu, Y. Zou, L. Xiao, X. Guo, Y. He, et al. *Journal of Materials Chemistry* **22**(34), 17724-17731 (2012).
- [15] Z. Zhao, H. Nie, C. Ge, Y. Cai, Y. Xiong, J. Qi, et al. *Advanced Science* **4**(8), 1700005 (2017).
- [16] L. Fan, R. Cui, X. Guo, D. Qian, B. Qiu, J. Yuan, Y. Zou. *Journal of Materials Chemistry C* **2**(28), 5651-5659 (2014).
- [17] L. Liu, J. Song, H. Lu, H. Wang, Z. Bo. *Polymer Chemistry* **7**(2), 319-329 (2016).
- [18] J. Zhou, Y. Zuo, X. Wan, G. Long, Q. Zhang, W. Ni, Y. Chen. *Journal of the American Chemical Society* **135**(23), 8484-8487 (2013).
- [19] C. Cabanetos, A.El Labban, J.A. Bartelt, J.D. Douglas, W.R. Mateker, J.M. Fréchet, P.M. Beaujuge. *Journal of the American Chemical Society* **135**(12), 4656-4659 (2013).
- [20] C. Piliego, T.W. Holcombe, J.D. Douglas, C.H. Woo, P.M. Beaujuge, J.M. Fréchet. *Journal of the American Chemical Society* **132**(22), 7595-7597 (2010).
- [21] Y. Zou, A. Najari, P. Berrouard, S. Beaupré, B. Réda Aich, Y. Tao, M. Leclerc. *Journal of the American Chemical Society* **132**(15), 5330-5331 (2010).
- [22] J.M. Jiang, H.K. Lin, Y.C. Lin, H.C. Chen, S.C. Lan, C.K. Chang, K.H. Wei. *Macromolecules* **47**(1), 70-78 (2014).
- [23] B.W. D'Andrade, S. Datta, S.R. Forrest, P. Djurovich, E. Polikarpov, M.E. Thompson. *Organic Electronics* **6**(1), 11-20 (2005).
- [24] N. Wang, X. Bao, Y. Yan, D. Ouyang, M. Sun, V.A.L. Roy, R. Yang. *Journal of Polymer Science. Part A: Polymer Chemistry* **52**(22), 3198-3204 (2014).
- [25] J. Cao, W. Zhang, Z. Xiao, L. Liao, W. Zhu, Q. Zuo, L. Ding. *Macromolecules* **45**(3), 1710-1714 (2012).
- [26] B.C. Thompson, J.M. Fréchet. *Angewandte Chemie International Edition* **47**(1), 58-77 (2008).
- [27] A.C. Stuart, J.R. Tumbleston, H. Zhou, W. Li, S. Liu, H. Ade, W. You. *Journal of the American Chemical Society* **135**(5), 1806-1815 (2013).

- [28] R. Zhao, Z. Bi, C. Dou, W. Ma, Y. Han, J. Liu, L. Wang. *Macromolecules* **50**(8), 3171-3178 (2017).
- [29] M. An, F. Xie, X. Geng, J. Zhang, J. Jiang, Z. Lei, L. Ding. *Advanced Energy Materials* **7**(14), 1602509 (2017).

Тиено[2,3-f]бензофуран ва тиенопирролдион асосида эгилувчан органик қуёш элементларини ишлаб чиқиш

Э.А Захидов¹, И.И. Тажибаев¹, А.А Сапарбаев¹, Ш.К. Нематов², В.О Кувондиқов¹, И.Р. Бойназаров¹, Ф.М. Рўзиев¹

¹ЎзР ФА Ион-плазма ва лазер технологиялари институти, Дурмон йўли 33, 100125, Тошкент, Ўзбекистон

²Тошкент давлат техника университети, Университет к. 4, 100174, Тошкент, Ўзбекистон.

Мазкур мақолада биз донор-акцептор туридаги боғланган полимер туридаги янги синтез қилинган PTBFD асосида органик қуёш элементини ишлаб чиқдик ва унинг характеристикаларини аъъанавий материал PBDTD билан қиёсий тарзда тадқиқ қилдик. Иккала полимер материали ҳам деярли бир хил оптик хоссаларга эга. XRD тадқиқотлари PTBFD полимери PBDTD нисбатан кўпроқ π - π боғларга эга эканлигини кўрсатди. Бу эса полимер занжирини зичроқ жойлашишини аңглатади. Фотовольтаик хоссалар бир хил тайёрлаш шароитларида турли комбинацияларда тадқиқ қилинди. PTBFD асосидаги органик қуёш элементи 1.09 В гача очик занжир кучланишида 4.33% энергия ўзгартириш самарадорлигини кўрсатди ва ушбу кўрсаткични PBDTD нисбатан 33% яхшиланишга олиб келди.

Калит сўзлар: Органик қуёш элементлари, тиено[2,3-f]бензофуран, боғланган полимерлар, ютилиш спектри, очик занжир кучланиши.

Исследование набухания полимерных мембран в кювете ограниченного размера с помощью Фурье ИК-спектроскопии

Н.Ф. Бункин¹, Л.М. Сабиров³, В.А. Козлов², Й.Т. Жураев³, Х.С. Хайдаров³

¹Московский государственный технический университет им. Н.Э.Баумана, 2-я Бауманская ул., д.5, building 1, 105005, Москва, Россия

²Институт общей физики имени А. М. Прохорова РАН, ул. Вавилова, д.38, 119991 ГСП-1, Москва, Россия

³Самаркандский государственный университет, Университетский бульвар, 15, 140104, Самарканд, Узбекистан

Получена 19.06.2021

* Corresponding author: e-mail: nbunkin@kapella.gpi.ru; x-xayrillo@samdu.uz Phone: +00 999 999 999

В экспериментах по Фурье ИК-спектроскопии изучен режим набухания полимерной мембраны нафлон в воде, залитой в кювету, характерный размер которой порядка толщины мембраны. Интерес к этим исследованиям обусловлен тем, что при набухании нафлона в кювете, размер которой много больше толщины мембраны, происходит эффективное «разматывание» полимерных волокон в объем воды [1]. Этот процесс не был изучен в случае, когда область, которую занимают размотанные полимерные волокна, ограничена размером кюветы. Показано, что в этом случае временная динамика перехода полимера из гидрофобного в гидрофильное состояние имеет ряд специфических особенностей, которые зависят от размера кюветы, от изотопного состава, содержания ионов и предварительной обработки воды. Пропитанные водой полимерные мембраны находят широкое применение в низкотемпературной водородной энергетике, используются в электролизерах, генераторах водорода, а также в водородных топливных элементах.

Ключевые слова: Фурье ИК-спектроскопия, спектр пропускания, полимерные мембраны, нафлон, гидрофобность и гидрофильность.

In the experiments of Fourier IR spectrometry we studied the swelling mode of the Nafion polymer membrane in water poured into cuvette, the characteristic size of which is on the order of the membrane thickness. The interest in these studies is due to the fact that when Nafion swells in a cell whose size is much larger than the membrane thickness, there is an effective "unwinding" of polymer fibers into the volume of water [1]. However, this process has not been studied in the case where the area that the unwound polymer fibers can occupy is limited by the size of the cuvette. It is shown that, in this case, the temporal dynamics of the transition of the polymer from the hydrophobic to the hydrophilic state has a number of specific features that depend on the size of the cell, as well as on the isotopic composition, ion content, and pre-treatment of water. The polymeric membranes impregnated with water, the study of which is devoted to this work, are widely used in low-temperature hydrogen power engineering, in electrolyzers, hydrogen generators, as well as in hydrogen fuel cells.

Keywords: Fourier infrared spectrometry, transmission spectrum, polymer membranes, nafion, hydrophobic and hydrophilic states.

<https://doi.org/10.52304/ujp.v23i2.244>

I. Введение

В последнее время полимерные мембраны из нафлона (NafionTM), разработанного фирмой

DuPont, очень интенсивно исследуются (н-р, обзор [2]). Интерес к этим исследованиям связан с применением нафiona в низкотемпературных водородных элементах [3, 4]. Нафion представляет собой полимерный (тефлоновый) каркас с подшитыми концевыми сульфогруппами. Известно, что тефлон гидрофобен, в то время как сульфогруппы обладают гидрофильными свойствами, т.е. набухший в воде нафion обладает амфифильными свойствами; в мембране нафiona формируется структура типа цилиндрических мицелл с заполненными водой каналами размером 2–3 нм. На границе этих каналов происходит диссоциация концевых сульфогрупп по схеме $R-SO_3H + H_2O \leftrightarrow R-SO_3^- + H_3O^+$, внутренняя поверхность каналов заряжена отрицательно. Поэтому внутрь каналов эффективно втягиваются катионы [5], что используется для пространственного разделения ионов H^+ и OH^- в установках по водородной энергетике.

В большинстве экспериментальных работ по нафionу, как правило, исследуется внутренняя структура самого полимера. В то же время в ряде работ были исследованы свойства слоев воды, прилегающей к поверхности полимерной мембраны. Так, в монографии [6] описаны эксперименты, в которых обнаружено, что при погружении мембраны нафiona в водную суспензию коллоидных микросфер эти микросферы отталкиваются от мембраны на расстояние порядка нескольких сотен микрон. Область, из которой эффективно выталкиваются коллоидные микросферы, получила название «исключенной зоны». Известно, (см., н-р, [7] и приведенные в этой работе ссылки), что твердотельная подложка может изменять свойства прилегающей к ней воды только в пределах 1–2 монослоев, т.е. в масштабах нескольких нанометров.

II. Материалы и методы

Эксперименты проводили на аналитическом Фурье-спектрометре ФСМ 2201 (ООО «Инфраспек», Россия, Санкт-Петербург). Спектрометр имел следующие характеристики:

- спектральный диапазон: $370\text{--}7800\text{ см}^{-1}$;
- спектральное разрешение во всем диапазоне: 1.0 см^{-1} ;
- абсолютная погрешность во всем диапазоне: $\pm 0.05\text{ см}^{-1}$.

Как и в описанных ранее экспериментах [8, 9], коэффициент пропускания исследован в диапазоне 1.8–2.2 мкм (по поводу выбора этого диапазона см. детальный комментарий в работе [7]). Исследованы пластинки нафiona N117 (Sigma Aldrich, USA) толщиной 175 мкм и площадью $1 \times 1\text{ см}^2$ (рис. 1); как будет ясно из дальнейшего, очень важно, чтобы размер пластинок нафiona был строго фиксирован.

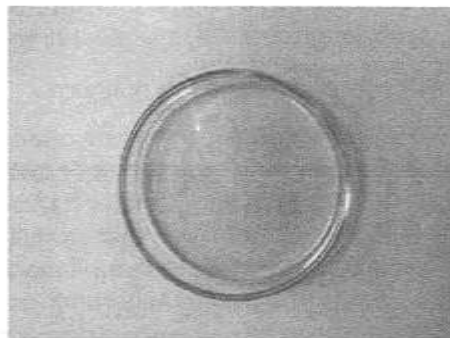


Рисунок 1. Фотография пластинок нафiona, используемых в эксперименте по Фурье ИК-спектроскопии; пластинки имеют одинаковую толщину и примерно одинаковую форму.

Пластинку нафiona помещали в герметичную кювету между окнами из CaF_2 ; этот материал прозрачен для ИК-излучения во всем исследуемом спектральном диапазоне (длинноволновая граница прозрачности соответствует $\lambda = 3\text{ мкм}$). В экспериментах качество полировки окон является важным и характерным размер шероховатости окон выбран равным 2.5–5 мкм. Перед каждым экспериментом эти окна промывали водой класса Milli-Q и затем высушивали с одновременным удалением пыли потоком химически чистого азота под высоким давлением. Расстояние L между окнами равно толщине кюветы и варьировалось с шагом 10 мкм в диапазоне 180–1000 мкм.

Далее в кювету заливалась вода, важно, чтобы объем заливаемой в кювету жидкости всегда превосходил объем самой кюветы, т.е. если мы заливаем жидкий образец в одно из входных отверстий, то из другого отверстия вода должна выливаться. Отверстия закрывали тефлоновыми вставками, но при этом герметичность отсутствовала, т.е. всегда сохранялся доступ воздуха. В качестве исследуемых жидких образцов была использована вода Milli-Q; удельное сопротивление в момент получения образца составляло

18 Мом-см, содержание дейтерия равно 157 ± 1 ppm [10]; также в ряде экспериментов было изучено набухание пластины нафтона в обедненной по дейтерию воде (Deuterium depleted water, Aldrich, USA, содержание дейтерия 1 ppm). Кроме того, были исследованы приготовленные на основе Milli-Q воды растворы NaCl в диапазоне концентраций $1-10^{-20}$ М, а также вода, подвергнутая интенсивному встряхиванию на виброплатформе Вортекс MSV-3500 на частоте 20 Гц в течение одной минуты.

III. Экспериментальные результаты

Нами были сняты спектры пропускания для нафтона, который вымачивался в различных жидкостях с интервалом 5 мин. На рис. 2 приведены типичные спектры пропускания K , снятые с интервалом 5 минут на временном интервале $70 < t < 100$ минут в обычной воде в кювете с расстоянием между окнами $L = 200$ мкм. Видно, что коэффициент пропускания K плавно уменьшается по мере набухания.

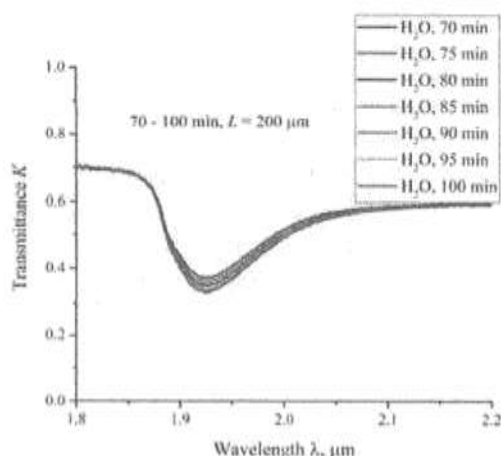


Рисунок 2. Спектры коэффициента пропускания K в диапазоне $1.8 < \lambda < 2.2$ мкм при вымачивании пластины нафтона в обычной воде (содержание дейтерия 157 ppm); расстояние между окнами кюветы $L=200$ мкм, интервал времени вымачивания $70 < t < 100$ мин.

На рис. 3 приведены зависимости коэффициента пропускания для воды, обедненной дейтерием (содержание дейтерия 3 ppm), в кювете с расстоянием между окнами $L = 200$ мкм с интервалом $0 < t < 25$ минут. Здесь $t=0$ соответствует времени заливки жидкого образца в кювету и снятию самого первого измерения, которое занимает примерно 15 секунд, т.е. самая

первая точка на этом графике соответствует моменту времени $t \approx 30$ сек. Видно, что спектры практически одинаковы для всех t . Здесь же мы приводим спектр пропускания для обычной воды, снятый в момент времени $t \approx 30$ сек. Этот спектр существенно отличается от соответствующих спектров для воды, обедненной дейтерием.

Отметим, что в нашей работе [11] изучены спектры пропускания воды в диапазоне 1.8–2.2 микрона в зависимости от содержания дейтерия и получено, что коэффициент пропускания одинаков в диапазоне $1 < C < 10^4$ ppm, т.е. обнаруженный эффект не может быть связан с различными поглощательными характеристиками обычной и обедненной по дейтерию воды. Мы связываем разницу спектров на рис. 3 с отсутствием разматывания полимерных волокон в обедненной по дейтерию воде и соответственно с отсутствием в этой воде полости.

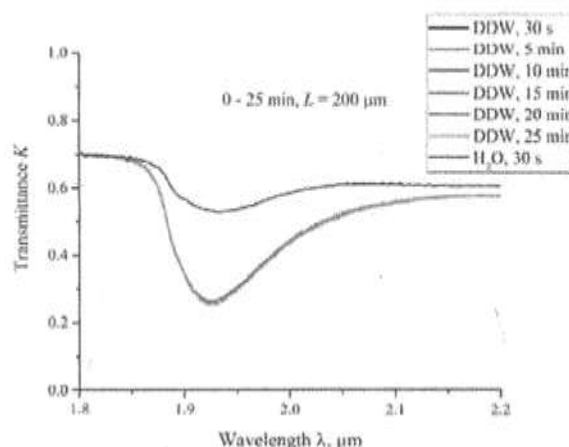


Рисунок 3. Спектры коэффициента пропускания в диапазоне $1.8 < \lambda < 2.2$ мкм при помещении пластины нафтона в кювету с обедненной по дейтерию водой; расстояние между окнами $L=200$ мкм, интервал времени вымачивания 30 секунд $< t < 25$ минут. Верхняя кривая – спектр коэффициента пропускания для обычной воды при времени вымачивания $t = 30$ с.

На основании полученных спектров можно оценить усредненную по длине кюветы L концентрацию воды $\langle C_w \rangle$. Перепишем закон Бугера в виде:

$$I(t) = I_0 \exp \left(-\kappa \int_0^L C_w(t, x) dx \right) \approx I_0 \exp \left(-\kappa \langle C_w(t) \rangle L \right), \quad (1)$$

получаем $\langle C_w(t) \rangle = \frac{|\ln K_{\min}(t)|}{\kappa L}$. В этой формуле учтена зависимость $\langle C_w \rangle$ от времени вымачивания t как от параметра.

На рис. 4 приведены зависимости $\langle C_w(t) \rangle$ от времени вымачивания t для кювет с расстоянием между окнами $L = 180, 190, 200, 210$ и 220 мкм. Пунктирная линия соответствует концентрации воды в сухом нафине $(C_w)_0 = 0.174$ (базовая линия).

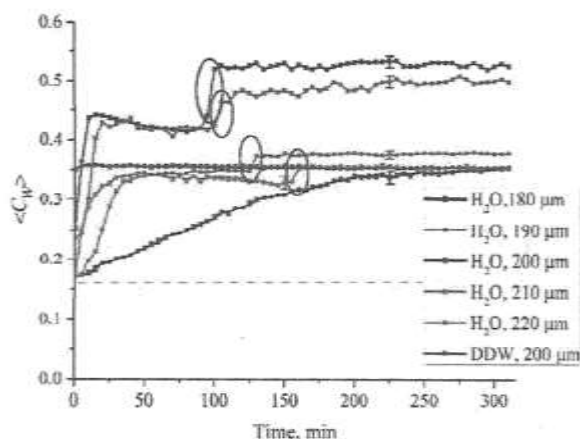


Рисунок 4. Зависимость средней концентрации воды $\langle C_w(t) \rangle$ при $180 \leq L \leq 220$ мкм для обычной воды (содержание дейтерия 157 ppm). Эллипсами помечены «вторые скачки». Также приведен график для вымачивания нафина в обедненной по дейтерию воде (содержание дейтерия 1 ppm). Штриховая линия соответствует концентрации воды $(C_w)_0 = 0.174$ для сухого нафина.

Рассмотрим (для определенности) зависимость $\langle C_w(t) \rangle$ для $L = 180$ мкм. Видно, что концентрация воды испытывает резкий скачок примерно через 10 мин набухания, что сопровождается схлопыванием полости. Будем называть такое резкое изменение «первым скачком». Далее, примерно на 90-й минуте набухания происходит еще один скачок, который не связан со схлопыванием полости (выделено контуром синего цвета); будем называть это «вторым скачком». Отметим, что вторые скачки, только с меньшей амплитудой, наблюдаются и для расстояний $L = 190, 210$ и 220 мкм (выделены соответствующими контурами).

Как показали наши измерения, первый скачок связан со схлопыванием полости; при этом вся поверхность полимера покрыта жидкостью, что соответствует обычному режиму набухания.

Таким образом, второй скачок может быть связан только с достаточно резким увеличением концентрации воды в объеме самой мембраны. Для проверки этой гипотезы мы изучали временной ход концентрации воды $\langle C_w(t) \rangle_0 = \frac{|\ln K_{\min}(t)|}{\kappa L_0}$ в объеме

мембраны при ее высыхании; здесь $L_0 = 175$ мкм – толщина пластинки нафина. В этом эксперименте мембрана нафина вымачивалась в кювете с расстоянием между окнами $L = 180$ мкм в течение $t_1 = 80$ и $t_2 = 110$ мин, т.е. до и после наступления второго скачка. Затем мы вытаскивали мембрану из кюветы, и она высыхала на воздухе при комнатной температуре (рис. 5). Зависимости концентрации воды $\langle C_w(t) \rangle_0$ от времени высыхания для времен набухания t_1 и t_2 различны. Это косвенно подтверждает гипотезу о том, что скачок зависимости $\langle C_w(t) \rangle$ на рис. 4 в интервале $t_1 < t < t_2$ связан со структурными изменениями в объеме мембраны, которые сопровождаются резким увеличением содержания воды. Отметим, что структурные фазовые переходы, которые происходят внутри полимерной матрицы при набухании в воде и сопровождаются резким ростом содержания воды в объеме мембраны, описаны, н-р, и в работе [12].

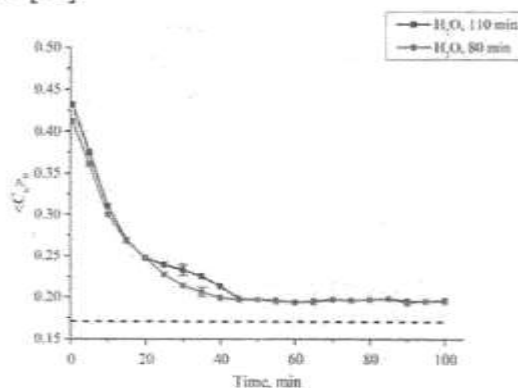


Рисунок 5. Зависимость средней концентрации воды $\langle C_w(t) \rangle_0$ от времени t высыхания нафина после вымачивания в кювете с расстоянием между окнами $L = 180$ мкм в течение 80 и 110 минут. Штриховая линия соответствует концентрации воды $(C_w)_0 = 0.174$ для сухого нафина.

Переход нафина из гидрофобного в гидрофильное состояние происходит при вымачивании пластинки нафина N117 (толщина пластинки 175 микрон) в обычной природной воде (содержание дейтерия 157 ppm) в кювете неограниченного объема (чашка Петри).

Очевидно, что при таком вымачивании происходит прорастание полимерных волокон в объем воды на расстояние $X_0 \approx 300$ мкм, в этом случае переход в гидрофильное состояние завершается на временах $190 < t < 200$ мин. Очевидно, что для пластинки нафiona N117, которая набухает в обычной воде в кювете с расстоянием между окнами $L = 180$ мкм, эффект прорастания подавлен за счет геометрического фактора. На наш взгляд, в этом случае переход в гидрофильное состояние происходит гораздо раньше, чем при набухании в чашке Петри. В пользу этой гипотезы также свидетельствуют зависимости $\langle C_w(t) \rangle$ для кювет с толщинами $L = 190, 210$ и 220 мкм. Для этих кювет второй скачок также наступает гораздо раньше, чем наступает переход в гидрофильное состояние при набухании полимерной мембраны в чашке Петри. Таким образом, можно сделать вывод, что эффект прорастания полимерных волокон влияет на кинетику набухания мембраны: чем слабее этот эффект выражен, тем быстрее наступает переход в гидрофильное состояние. Исследования в этом направлении продолжаются, и данный вывод в дальнейшем будет уточнен.

IV. Обсуждение результатов

Как уже отмечалось, особенности временной динамики полости мы связываем с эффектом прорастания полимерных волокон в объем воды. Этот вывод основан на отсутствии этой полости в воде, обогатившей дейтерием, для которой эффект прорастания отсутствует. Если расстояние L между окнами кюветы меньше размера X_0 области, внутрь которой прорастают полимерные волокна в случае "неограниченного" размера кюветы, то проросшие в объем воды полимерные волокна неизбежно упрутся в окна кюветы, что должно привести к возникновению поля механических напряжений и связанных с ними деформаций, т.е. в данном случае проявляются микрореологические свойства набухающей мембраны. Важно, что эти напряжения возникают в системе "скрученных" полимерных волокон, которые исходно обладают гидрофобными свойствами, т.е. положение молекулы воды, оказавшейся в промежутках между такими волокнами, будет неустойчивым.

Следует ожидать, что на динамику формирования и схлопывания полости должны влиять нанопузырьки растворенного газа.

Действительно, исследуемые жидкие образцы не были дегазированы. При разматывании полимерных волокон на поверхности гидрофобной мембраны возникают выступы и неровности, которые играют роль центров нуклеации поверхностных нанопузырьков [13]. Эти нанопузырьки "выносятся" прорастающими волокнами в сторону окна кюветы, и в поле возникающих механических напряжений может происходить коалесценция (схлопывание) нанопузырьков, что должно вносить вклад в формирование полости. Это косвенно подтверждается результатами, полученными с водными растворами NaCl, а также с образцами, подвергнутыми встряхиванию.

Действительно, как показано в [12-14], в водных растворах солей в объеме жидкости возникают стабилизируемые ионами газосодержащие нанопузырьки с радиусом порядка 200 нм. Объемная плотность стабилизируемых ионами газосодержащих нанопузырьков в деионизированной воде (наличие ионной компоненты в этом случае обусловлено собственной диссоциацией молекул воды) $n \sim 10^6$ см⁻³, т.е. между поверхностью мембраны площадью ~ 1 см² и окном кюветы находится $\sim 10^3$ нанопузырьков. При этом величина n зависит от концентрации электролита C как $C^{1/4}$, выходя на плато $n \sim 10^8$ см⁻³ при $C = 0.1$ М. Можно предположить, что незначительное замедление схлопывания полости связано именно с повышением объемной плотности нанопузырьков. По-видимому, механизм, связанный с нанопузырьками, должен проявляться и для кювет, окна которых имеют разную шероховатость; при контакте гидрофобного полимерного волокна и твердотельной подложки нанопузырьки должны генерироваться более эффективно на более шероховатой поверхности. Очевидно, что для более детального анализа необходимо провести эксперименты с дегазированной водой. Однако механизм, связанный с присутствием нанопузырьков, не может быть ключевым для формирования полости, поскольку нанопузырьков слишком мало.

V. Заключение

Таким образом, основной механизм формирования полости — это именно исходно гидрофобные свойства полимерных волокон. Поскольку пластинка нафiona в периферийных

областях контактирует с водой, размотанные полимерные волокна с течением времени приобретают гидрофильные свойства, и полость в конце концов схлопывается.

Метаданные

Investigation of the swelling of polymer membranes in a cuvette of limited size using Fourier transform infrared spectrometry

N.F. Bunkin^{1,2}, L.M. Sabirov³, V.F. Kozlov^{1,2}, Y.T. Ju-
raev³, Kh.S. Khaydarov³

¹ Bauman Moscow State Technical University, 2-nd Bau-
manskaya st., 5, building 1, 105005, Moscow, Russia

² A.M. Prokhorov General Physics Institute, Russian Acad-
emy of Sciences, Vavilova st., 38, 119991 GSP-1, Mos-
cow, Russia

³ Samarkand State University, University Boulevard 15,
140104, Samarkand, Uzbekistan

In the experiments of Fourier IR spectrometry we studied the swelling mode of the Nafion polymer membrane in water poured into cuvette, the characteristic size of which is on the order of the membrane thickness. The interest in these studies is due to the fact that when Nafion swells in a cell whose size is much larger than the membrane thickness, there is an effective "unwinding" of polymer fibers into the volume of water [1]. However, this process has not been studied in the case where the area that the unwound polymer fibers can occupy is limited by the size of the cuvette. It is shown that, in this case, the temporal dynamics of the transition of the polymer from the hydrophobic to the hydrophilic state has a number of specific features that depend on the size of the cell, as well as on the isotopic composition, ion content, and pretreatment of water. The polymeric membranes impregnated with water, the study of which is devoted to this work, are widely used in low-temperature hydrogen power engineering, in electrolyzers, hydrogen generators, as well as in hydrogen fuel cells.

Keywords: Fourier transform infrared spectrometry, transmission spectrum, polymer membranes, nafion, hydrophobic and hydrophilic states

Литература (References)

- [1] N.F. Bunkin, A.V. Shkirin, V.A. Kozlov, B.W. Ninham, E.V. Uspenskaya, S.V. Gudkov, J. Chem. Phys. **149**, 164901 (2018).
- [2] K.A. Mauritz, R.B. Moore, Chem. Rev. **104**, 4535-4585 (2004).
- [3] L. Liu, W. Chen, Y. Li, J. Membr. Sci. **504**, 1-9 (2016).
- [4] Y. Wang, K.S. Chen, J. Mishler, S.C. Cho, X.C. Adroher, Appl. Energy **88**, 981-1007 (2011).

- [5] N.F. Bunkin, A.A. Balashov, A.V. Shkirin, V.S. Gorelik, et al. Investigation of deuterium substitution effects in a polymer membrane using IR Fourier spectrometry. Opt. and Spectr. **125**, 337-342 (2018).
- [6] G.H. Pollack. The Fourth phase of water (Ebner and Sons Publishers: Seattle, WA, USA, 2013).
- [7] N.F. Bunkin, V.A. Kozlov, A.V. Shkirin, B.W. Ninham, A.A. Balashov, S.V. Gudkov. Dynamics of Nafion membrane swelling in H₂O/D₂O mixtures as studied using FTIR technique. J. Chem. Phys. **148**, 124901 (2018).
- [8] S.O. Yurchenko, A.V. Shkirin, B.W. Ninham, A.A. Sychev, V.A. Babenko, N.V. Penkov, N. P. Kryuchkov, and N.F. Bunkin, Ion-specific and thermal effects in the stabilization of the gas nanobubble phase in bulk aqueous electrolyte solutions. Langmuir, Special Issue: Nanobubbles (2016).
- [9] N.F. Bunkin, V.A. Kozlov, A.V. Shkirin, B.W. Ninham, A.A. Balashov, S.V. Gudkov. J. Chem. Phys. **148**, 124901 (2018).
- [10] G. Gebel. Polymer **41**, 5829-5838 (2000).
- [11] E.M. Furst, T.M. Squires. Microrheology. Oxford University Press (2017).
- [12] M. Alheshibri, J. Qian, M. Jehannin, V.S.J. Craig. Langmuir **32**, 11086 (2016).
- [13] N.F. Bunkin, F.B. Bunkin. UFN **186**, 933-952 (2016).
- [14] N.F. Bunkin, A.V. Shkirin, N.V. Suyazov, V.A. Babenko, N.V. Penkov, K.N. Belosludtsev, S.V. Gudkov. J. Phys. Chem. B **120**, 1291-1303 (2016).

Фурье ИК-спектрометрияси ёрдамида чекланган катталикдаги ҳужайрада полимер мембраналарнинг шишишини ўрганиш

Н.Ф. Бункин¹, Л.М. Сабиров³, В.А. Козлов², Й.Т. Жураев³, Х.С. Хайдаров³

¹Н.Е. Бауман номидаги Давлат техника университети, 2-чи Бауман к., 5, 105005, Москва, Россия

²А.М. Прохоров номидаги Умумий физика институти, Вавилов к., 38 уй, 119991, Москва, Россия

³Самарканд давлат университети, Университет хиёбони 15, 140104, Самарканд, Ўзбекистан

Ушбу ишда Фурье ИК спектрометриясида ўтказилган тажрибаларда биз нафион полимер мембранасининг кюветага қўйилган сувдаги шишиш режимини ўргандик, унинг характерли катталиги мембрананинг калинлиги тартибда. Ушбу тадқиқотларга бўлган қизиқиш, нафионнинг катталиги мембрана калинлигидан каттароқ бўлган кюветада шишганда, сув ҳажмига полимер толаларини самарали равишда "очиши" содир бўлади, деб қаралган [1]. Аммо, бу жараён, очилмаган полимер толалари эгаллаши мумкин бўлган майдон кюветанинг катталиги билан чекланган ҳолда ўрганилмаган. Кўрсатилганидек, бу ҳолда, полимернинг гидрофоб ҳолатидан гидрофил ҳолатга ўтишининг вақтга боғлиқлик динамикаси кюветанинг катталигига, шунингдек изотопик таркибига, ион таркибига боғлиқ бўлган бир қатор

ўзига хос хусусиятларга эга ва сувни қайта ишлаш мумкин. Шунингдек, масалан, биомедитсина ва фармакологияда кенг қўлланилиши сабабли эътибор берилади. Сувга сингдирилган полимерик мембраналар, бу иш бағишланган, паст ҳароратли водород энергетикасида кенг қўлланилади, чунки бу мембраналар электролизаторларда, водород генераторларида, шунингдек, водород ёқилғи камераларида ишлатилади.

Калит сўзлар: Фуре ИҚ-спектрометрияси, водород энергетикаси, нафион, полимер мембраналари, гидрофоблиги ва гидрофиллиги

Влияние наночастиц SiO_2 на фазовую устойчивость функциональных полиэлектролитов

С.З. Мирзаев, К.Б. Эгамбердиев, Б.А. Аллаев*, О.В. Трунилина, С.К. Теляев

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий имени У.А. Арифова АН РУз, Дурмон йули 33, 100125, Ташкент, Узбекистан

Получена 17.09.2021

* Corresponding author: e-mail: bahtiyor.74.74@mail.ru, Phone: +998 90 911-00-64

Повышена стабильность полиэлектролитного антиадгезионного состава добавлением наночастиц SiO_2 концентрации от 0.1 до 1.0 мас.%. Использовались наночастицы SiO_2 марки Aerosil размером 100–200 нм, распределение по размерам и трекинг анализ которых производили на анализаторе NanoSight LM10. Дисперсная среда состояла из бидистиллированной воды. В качестве дисперсной фазы использовано индустриальное масло. Исследуемые образцы готовили с использованием воды с наночастицами SiO_2 , образцы сравнения готовили аналогично, но с бидистиллированной водой без наночастиц. Фазовую устойчивость образцов определяли через определенные промежутки времени по выделению дисперсионной фазы и/или появлению границы расслаивания образца. Увеличение стабильности на 20% достигнуто образованием монослоя наночастиц на межфазных границах дисперсной фазы и несущей среды.

Ключевые слова: наночастицы, полиэлектролит, диоксид кремния, стабильность, модификация.

The stability of the polyelectrolyte of anti-adhesive compound was increased by adding SiO_2 nanoparticles with a concentration of 0.1 to 1.0 wt%. We used Aerosil SiO_2 nanoparticles with a size of 100–200 nm, the size distribution and tracking analysis of which was performed on a NanoSight LM10. An increase in stability by 20% was achieved by the formation of a monolayer of nanoparticles at the interphase boundaries of the dispersed phase and the carrier medium. The bidistilled water was used as the dispersed medium, and industrial oil was used as the dispersed phase. The test samples were prepared using water with SiO_2 nanoparticles, the comparison samples were prepared similarly, but with bidistilled water without nanoparticles. The phase stability of the samples was determined at certain intervals by the release of the dispersion phase and/or the appearance of the phase boundary of the sample. An increase in stability by 20% was achieved by the formation of a monolayer of nanoparticles at the interphase boundaries of the dispersed phase and the carrier medium.

Keywords: nanoparticles, polyelectrolyte, silicon dioxide, stability, modification

<https://doi.org/10.52304/v23i2.245>

I. Введение

Полиэлектролиты со сложным термодинамическим поведением, позволяющим осуществлять

гетерогенное равновесие многокомпонентных систем без химических реакций, широко применяются на практике, имеют большое значение в таких отраслях как строительство, где они пред-

ставлены, в частности, в качестве разделительных агентов. Для успешного регулирования динамики межфазных границ и достижения прогнозируемого эффекта в полном объеме, в таких системах необходимо использование исходных компонентов с небольшим разбросом концентраций функционального вещества, а также применение модифицирующих добавок, придающих необходимые эксплуатационные параметры. В качестве таких добавок достаточно успешно используется нанокремнезем, т.е. наночастицы SiO_2 с диаметром в диапазоне от 10 до 150 нм и концентрацией от 0.1 (добавляемых в качестве водной суспензии) до 10 массовых долей (добавляемых в смесь). Если угол смачивания составляет 30° , энергия отрыва наночастиц SiO_2 диаметром 15 нм от межфазной границы вода/масло достигает ~ 40 кТ, а в условиях 90° увеличивается уже до ~ 2000 кТ, т.е. происходит практически необратимая адсорбция наночастиц на межфазной поверхности [1-3], в отличие от аналогичного случая для молекул ПАВ, которые находятся в динамическом адсорбционном равновесии. Поэтому эмульсии, стабилизированные наночастицами, как правило, характеризуются высокой фазовой устойчивостью, зависящей, однако, от динамики межфазных границ, связанной с комплексным взаимодействием всех компонентов полиэлектrolита.

В работе рассмотрены эксперименты по использованию наночастиц SiO_2 для повышения стабильности, связанной с фазовой устойчивостью полиэлектrolитов на примере разработанного и запатентованного антиадгезионного разделительного смазочного состава, который существенно улучшает качество формуемой поверхности [4], упрощая ее финишную отделку и облегчая уход за контактной поверхностью формы за счет улучшения антиадгезионных свойств состава, что позволяет существенно снизить энергозатраты. Процессы, протекающие при этом в таких полиэлектrolитах существенно зависят от природы стабилизирующих наночастиц.

II. Объекты и методы исследования

Стабилизирующее действие наночастиц SiO_2 изучали в образцах полиэлектrolита антиадгезионного состава объемом 100 мл, приготовленного по рецептуре [4] с основными физико-химическими параметрами согласно табл. 1.

Таблица 1. Физико-химические показатели антиадгезионного состава согласно [4].

Наименование показателя	Единица измерения	Значение
Плотность при 20°C	г/см ³	1.25
Водородный показатель pH	—	8–9
Массовая доля масла	мас. %	15
Массовая доля воды	мас. %	15
Массовая доля свободной щелочи в пересчете на NaOH	мас. %	2

Дисперсионная среда состояла из бидистиллированной воды. В качестве дисперсионной фазы использовано индустриальное масло. Исследуемые образцы готовили согласно процедуре, описанной в [4], с использованием воды с наночастицами SiO_2 . Образцы сравнения готовили аналогично, но с бидистиллированной водой без наночастиц. Фазовую устойчивость образцов определяли через определенные промежутки времени (1 сут., 10, 30, 60, 90, 100, 110, 120 сут.) по выделению дисперсионной фазы и/или появлению границы расслаивания образца.

Для эксперимента использовали гидрофобные наночастицы SiO_2 марки Aerosil диаметром от 100 до 200 нм. Суммарная концентрация наночастиц SiO_2 в непрерывной фазе составляла от 0.1 до 1.0 мас.%, что соответствует 10^7 – 10^8 частиц/мл. Распределение наночастиц по размерам в водной среде определяли с помощью анализатора наночастиц Nanosight LM10 фирмы Malvern согласно методике NTA (nanoparticles tracking analysis), используемая длина волны лазера 642 нм.

III. Результаты эксперимента и их анализ

В результате стабилизации эмульсий на границах раздела фаз образуется слой наночастиц модификатора-стабилизатора, который может иметь различную структуру. Капли дисперсной фазы окружены сформированными возможными структурами, такими как монослой частиц, бислой частиц и разветвленная сетка, состоящая из агрегатов частиц (рис. 1).



Рисунок 1. Структуры стабилизирующего слоя наночастиц, образующиеся между дисперсионными фазами в эмульсии: (а) монослой, (б) бислой и (в) разветвлённая сетка агрегатов [2].

Монослой твёрдых частиц (рис. 1а) стабилизирует дисперсионную фазу в том случае, если краевой угол смачивания частиц водной фазой $< 90^\circ$ (обычно от 30° до 70°) [2, 3]. При увеличении концентрации наночастиц в системе до определенного уровня происходит формирование на поверхности капель более плотно упакованного слоя наночастиц и появление бислоя в области контакта таких капель (рис. 1б). Разветвлённая сетка агрегатов стабилизирует дисперсионную фазу в случае агрегации частиц в дисперсионной среде (рис. 1в), образуя трёхмерную сетку наночастиц, препятствующую движению и агрегации капель [2 и ссылки в ней]. NTA анализ наночастиц SiO₂, полученный с помощью Nanosight LM10 представлен на рис. 2 и рис. 3.

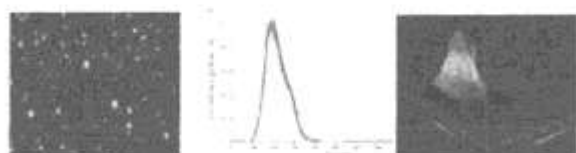


Рисунок 2. NTA анализ 10^7 /мл наночастиц SiO₂ в водном растворе: в центре – распределение по размерам, слева – соответствующий видеокадр, справа – 3D-график зависимости размер частиц-интенсивность-концентрация.

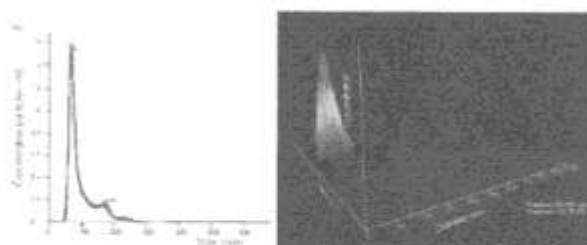


Рисунок 3. NTA анализ 10^8 /мл наночастиц SiO₂ в водном растворе: слева – распределение по размерам, справа – 3D-график зависимости интенсивность-размер-концентрация.

Результаты определения фазовой устойчивости исследованных образцов представлены в табл. 2.

Таблица 2. Сравнительная динамика устойчивости исследуемых образцов антиадгезионного состава с добавлением наночастиц SiO₂ и аналогичного образца без наночастиц.

Динамика фазовой устойчивости, сут.	1	10	30	60	90	100	110	120
Выделение дисперсной фазы в образце сравнения, мас. %	2	2	2	2	2	2	10	Полное расслоение
Выделение дисперсной фазы в исследуемом образце, мас. %	2	2	2	2	2	2	2	2

Из таблицы видно, что исследуемый образец антиадгезионного состава с добавлением наночастиц SiO₂ сохраняет стабильность в течение 120 суток, в то время как образец сравнения без наночастиц на 110 сутки проявляет признаки появляющегося расслоения и завершает полное расслоение к 120 суткам.

IV. Обсуждение результатов и заключение

Использование наночастиц в качестве модифицирующих агентов обусловлено высокой химической активностью, связанной с высокими значениями их удельной поверхности, достигающими до $1000 \text{ м}^2/\text{г}$, при этом они могут быть как природного, так и искусственного происхождения. Как правило, при малых концентрациях от 0.01% до 1–5% применяется предварительное добавление в дисперсионную среду коллоидных растворов наночастиц – золей. При добавлении наночастиц в малых дозах важно достичь равномерного распределения нанодобавки в несущей среде. Для этого служит жидкая непрерывная фаза. Наночастицы SiO₂ при размерах от 10 до 200 нм имеют удельную поверхность от $180 \text{ м}^2/\text{г}$ и более и так же проявляют высокую активность при малых концентрациях. Зависимости скорости адсорбции наночастиц на межфазной поверхности в эмульсии сходны с кинетическими кривыми адсорбции молекул ПАВ на границе раздела фаз [5]. Для описания скорости адсорбции наночастиц в

[5] было использовано уравнение, аналогичное уравнению, используемому для описания кинетики мономолекулярной адсорбции молекул ПАВ в соответствии с теорией Ленгмюра:

$$dA/dt = k(A_p - A),$$

где A – адсорбция; k – константа скорости адсорбции; A_p – равновесная адсорбция; t – время. Решение уравнения адсорбции имеет вид:

$$A = A_p [1 - \exp(-kt)].$$

Зависимость степени заполнения поверхности дисперсионной фазы адсорбированными наночастицами SiO_2 от времени хорошо описывается этим уравнением только при малых значениях ионной силы раствора, составляющего дисперсионную среду эмульсий, при $I=50$ моль/м³ [5]. При более высоких значениях ионной силы стандартное отклонение расчётных данных возрастает. Так, при ионной силе 2000 моль/м³ капли масла стабилизировались одинарным слоем наночастиц SiO_2 . При более высоких и более низких значениях ионной силы система оказывалась неустойчивой, капли масла сближались друг с другом до нулевого расстояния, что вызывает явление коалесценции в эмульсии. В [5] использовался метод динамики Ланжевена для описания кинетики движения наночастиц и дисперсионной фазы. При этом рассматривалась обратимая агрегация наночастиц SiO_2 , в то время как их адсорбция на поверхность капель масла считалась необратимой в связи с тем, что энергия отрыва наночастиц от поверхности дисперсионной фазы превышает 1000 кТ [6]. Расчёты в [5] проводили с использованием физико-химических параметров, полученных в независимых физико-химических экспериментах. Диаметр капель внутренней фазы составлял 1000 мкм. Минимальное расстояние между каплями масла при генерации было равно 200 нм. Диаметр частиц SiO_2 был равным 50 нм, частицы генерировались на расстоянии 10 нм друг от друга. Эффективность стабилизации зависела от скорости адсорбции наночастиц на поверхности капель, которая, в свою очередь, зависела от размера и концентрации наночастиц и физико-химических параметров дисперсионной фазы и дисперсионной среды. В результате было показано, что при ионной силе 2000 моль/м³ дисперсионная фаза стабилизировалась одинарным слоем наночастиц SiO_2 , без возникновения ее

флокуляции. Учитывая структурные особенности водных растворов электролитов [7-10], а также то обстоятельство, что исследованная система по физико-химическим свойствам [11-15] близка к параметрам, рассмотренным в [5], можно утверждать, что и в данном случае стабилизирующее действие наночастиц SiO_2 обусловлено формированием одинарного их слоя на межфазных границах, что оказалось достаточным для повышения фазовой устойчивости системы.

Метаданные

Influence of SiO_2 nanoparticles on the polyelectrolyte anti-adhesive compound phase stability

S.Z. Mirzaev, K.B. Egamberdiev, B.A. Allaev, O.V. Trunilina, S.K. Telayev

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies named after U. A. Arifov of the Academy of Sciences of the RUz, Durmon Yuli str., 33, 100125, Tashkent, Uzbekistan

The stability of the polyelectrolyte of anti-adhesive compound was increased by adding SiO_2 nanoparticles with a concentration of 0.1 to 1.0 wt%. We used Aerosil SiO_2 nanoparticles with a size of 100–200 nm, the size distribution and tracking analysis of which was performed on a Nano-Sight LM10. An increase in stability by 20% was achieved by the formation of a monolayer of nanoparticles at the interphase boundaries of the dispersed phase and the carrier medium. The bidistilled water was used as the dispersed medium, and industrial oil was used as the dispersed phase. The test samples were prepared using water with SiO_2 nanoparticles, the comparison samples were prepared similarly, but with bidistilled water without nanoparticles. The phase stability of the samples was determined at certain intervals by the release of the dispersion phase and/or the appearance of the phase boundary of the sample. An increase in stability by 20% was achieved by the formation of a monolayer of nanoparticles at the interphase boundaries of the dispersed phase and the carrier medium.

Keywords: nanoparticles, polyelectrolyte, silicon dioxide, stability, modification

Литература (References)

- [1] D.J. French, P. Taylor, J. Fowler, P.S. Clegg. Making and breaking bridges in a Pickering emulsion. *J. Colloid Interface Sci.* **441**, 30-38 (2015).
- [2] D.A. Bydanov, M.Yu. Korolyova, E.V. Yurtov. Vliyanie struktury gelya, obrazovannogo protivopolozhno zaryazhennymi nanochastictami SiO_2 na sedimentacionnyuyu ustojchivost' stabiliziruemykh imi emul'sij. *Uspekhi v Himii i Himicheskoy Tekhnologii XXXI*. No.13, 16-18 (2017).

- [3] M.Yu. Koroleva, D.A. Bydanov, E.V. Yurtov. Stabilizatsiya pryamyh emul'sij Pikinga nanochasticami SiO₂, modifitsirovannymi PAV. Kolloidnyy Zhurnal 81, No.1, 61-69 (2019).
- [4] S.Z. Mirzaev, O.V.Trunilina, B.A. Allaev. Patent IAP 05688 «Pasta smazochnaya dlya form». Agentstvo po intellektual'noj sobstvennosti Respubliki Uzbekistan, Rasmij Ahborotnoma № 11, S 41, (2018).
- [5] A.M. Tokarev, N.V. Dobrozhiy, M.Yu. Koroleva. Modelirovanie stabilizatsii pryamyh emul'sij nanochasticami SiO₂. Uspekhi v Himii i Himicheskoy Tekhnologii XXVII. No.6, 125-128 (2013).
- [6] B.P. Binks. Particles as surfactants-similarities and differences. Current Opinion in Colloid & Interface Science 7, No.1-2, 21-41 (2002).
- [7] M.F. Chaplin. A proposal for the structuring of water. Biophys. Chem. 83, No.2, 211-221 (2002). www.jsbu.ac.uk/water/chaplin.
- [8] S.J. Grabowski. A new measure of hydrogen bonding strength – *ab initio* and atoms in molecules studies. Chem. Phys. Lett. 338, 361-366 (2001).
- [9] Shui Yin Lo, Xu Gengb, David Gann. Evidence for the existence of stable-water-clusters at room temperature and normal pressure. Physics Letters A 373(42), 3872-3876 (2009).
- [10] R. Ludwig. The effect of hydrogen bonding in the thermodynamic and spectroscopic properties of molecular clusters and liquids. Phys. Chem. Chem. Phys. 4, 5481-5387 (2002).
- [11] K. Bhattacharjee, U.Kaatze, S.Z.Mirzaev. Sound attenuation near the demixing point of binary liquids. Interplay of critical dynamics and noncritical kinetics. Rep. Prog. Phys. 73, No.6, p. 36 (2010).
- [12] S.Z. Mirzaev, S.Q. Telyaev. Relaxation spectroscopy of SiO₂-water nanofluids. Uzb. J. Phys.14, No.5-6, 322-325 (2012).
- [13] S.Z. Mirzaev, U.A. Yokubov, S.K. Telyaev. The using silicon dioxide nanoparticles in cement as an additive. In: The 7-th CAS-TWAS Symposium on Green Technology, 22-25 July, Beijing, China, p.102 (2018).
- [14] S.Z. Mirzaev, U.A. Yokubov, S.K. Telyaev. Ultrasonic relaxation spectroscopy of suspensions of particles in water. In: 21-st International Symposium on Nonlinear Acoustics (ISNA) and the International Conference on Nonlinear Elasticity in Materials (ICNEM), 9-13 July, 2018, New Mexico, USA, p.21-4 (2018).
- [15] S.Z. Mirzaev, U.A. Yokubov, S.K. Telyaev. The technology of introducing active nanoadditives into the cement. 6th International Conference & Exhibition on Advanced & Nano Materials (ICANM 2018), 6-8 August, Quebec, Canada, p.55 (2018).

Функционал полиэлектролитларнинг фазавий баркарорлигига SiO₂ нанозаррачаларнинг таъсири

С.З. Мирзаев, К.Б. Эгамбердиев, Б.А. Аллаев, О.В. Трунилина, С.К. Теляев

Ўзбекистон Республикаси Фанлар академиясининг У.А. Орифов номидаги Ин-плазма ва лазер технологиялари институти, Дўрмон йўли 33, 100125 Тошкент, Ўзбекистон

SiO₂ нанозарраларнинг концентрациясига 0.1 дан 1.0% мас гача қўшилиши полиэлектролитли антиадгезион таркибнинг баркарорлиги ошади. Ўлчамлар бўйича тақсимлаш ва трекинг NanoSight LM10 анализаторида Aerosil маркали 100–200 нм ўлчамдаги SiO₂ нанозарралари қўлланилган ҳолда кузатувлар олиб борилган. Дисперсланган мухит бидистилляцияланган сувдан ташкил топган. Дисперс фаза учун индустриал мой ишлатилган. Тадқиқот қилинаётган намуналар SiO₂ нанозаррачали сув билан тайёрланган, таққослаш намуналари худди шу усулда тайёрланиб нанозаррачали сув ўрнига бидистилланган сув ишлатилган. Тадқиқот қилинаётган намуналарда маълум вақт оралиғида дисперс фазанинг ажралиши ёки ажралиш чегарасининг қўриниши орқали фазавий баркарорлиги аниқланди. Монокатлам нанозарраларнинг фазавий оралиқ дисперс чегаралари ва дисперс мухитлари пайдо қилиш натижасида баркарорлик 20% га оширилди.

Калит сўзлар: нанозарралар, полиэлектролит, кремний диоксиди, баркарорлик, модификация

UZBEK JOURNAL OF PHYSICS 2021 Volume 23 Number 2 ISSN 1025- 8817

INDEX
874