

Материалы секции
КВАНТОВАЯ
ФИЗИКА



22-27 апреля 2018
НОВОСИБИРСК

НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

МНСК-2018

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

Материалы
56-й Международной научной студенческой конференции

22–27 апреля 2018 г.

Новосибирск
2018

УДК 53
ББК 22.31я431
К 32

Научный руководитель секции — акад. РАН, д-р физ.-мат. наук,
проф. А. В. Латышев

Председатель секции — чл.-корр. РАН, д-р физ.-мат. наук А. В. Тайченачев

Ответственный секретарь секции — канд. физ.-мат. наук А. А.Bloшкин

Экспертный совет секции:
д-р физ.-мат. наук В. Л. Альперович
д-р физ.-мат. наук Д. Х. Квон Зе Дон
канд. физ.-мат. наук Д. Р. Исламов
канд. физ.-мат. наук А. А. Bloшкин
канд. физ.-мат. наук Г. Э. Шайблер

К 32 Квантовая физика : Материалы 56-й Междунар. науч. студ. конф.
22–27 апреля 2018 г. / Новосиб. гос. ун-т. — Новосибирск : ИПЦ НГУ,
2018. — 36 с.

ISBN 978-5-4437-0743-3

УДК 53
ББК 22.31я431

ISBN 978-5-4437-0743-3

© СО РАН, 2018
© Новосибирский государственный
университет, 2018

NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY
SIBERIAN BRANCH OF THE RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

ISSC-2018

QUANTUM PHYSICS

Proceedings
of the 56th International Students Scientific Conference

April, 22–27, 2018

Novosibirsk
2018

УДК 53
ББК 22.31я431
К 32

Section scientific supervisor — Academician,
Dr. Phys.-Math., Prof. A. V. Latyshev

Section head — Corresponding Member RAS,
Dr. Phys.-Math. A. V. Taichenachev
Responsible secretary — Cand. Phys.-Math. A. A. Bloshkin

Section scientific committee:
Dr. Phys.-Math. V. L. Alperovich
Dr. Phys.-Math., Assoc. Prof. D. Kh. Kvon Ze Don
Cand. Phys.-Math. D. R. Islamov
Cand. Phys.-Math. A. A. Bloshkin
Cand. Phys.-Math. G. E. Shaibler

К 32 Quantum physics : Proceedings of the 56th International Students Scientific Conference. April, 22–27, 2018 / Novosibirsk State University. — Novosibirsk : IPC NSU, 2018. — 36 p.

ISBN 978-5-4437-0743-3

УДК 53
ББК 22.31я431

ISBN 978-5-4437-0743-3

© SB RAS, 2018
© Novosibirsk State University, 2018

Моделирование структуры, состава и термодинамических условий смешанного гидрата $Ag + Kr$

В. Ю. Амельчукова, Д. С. Попова, Д. В. Федорова
Новосибирский государственный университет,
Новосибирский государственный технический университет

Клатратные гидраты благородных газов используются для решения проблем разделения и обогащения смесей, хранения и транспортировки. Данная работа посвящена поиску условий формирования клатратов $Ag + Kr$.

В работе изучались молекулярные кластеры на основе клатратных гидратов КС-I, КС-II с целью моделирования больших и малых полостей клатратного смешанного гидрата $Ag + Kr$. Получены равновесные расстояния, электронная плотность, энергии стабилизации для всех рассматриваемых систем.

Все структуры клатратных гидратов, 5^{12} , $5^{12}6^2$ и $5^{12}6^4$ с и без молекул $Ag + Kr$ ($1Ag+1Kr@5^{12}$; $1Ag+1Kr.@5^{12}6^2$; $1Ag+1Kr.@5^{12}6^4$), в качестве молекул гостей, рассматриваемые в данном исследовании, оптимизированы с помощью гибридного потенциала метода функционала электронной плотности (DFT) B3LYP в сочетании с 6-311G базисом. При геометрической оптимизации клатратных структур были заморожены длины связи O-H и угол H-O-H молекул воды, находящихся в каркасе клатратного гидрата. Все электронные расчеты были проведены с помощью пакета программ Gaussian 09. Подробно были рассмотрены вышеуказанные кластеры, являющиеся структурными составляющими клатратных гидратов КС-I и КС-II, на предмет их энергии стабилизации, распределения электронной плотности. Структуры полостей гидратов моделировалась при термодинамических условиях образования гидратов $Ag + Kr$. Получены термодинамические данные об энергии Гиббса, энтальпии и энтропии реакции процесса образования больших и малых полостей смешанных гидратов $Ag + Kr$.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №18-08-00803.

Научные руководители — д-р физ.-мат. наук, доцент А. П. Калинина,
канд. физ.-мат. наук Ю. Ю. Божко

**Синтез и исследование свойств и стабильности
поликристаллических пленок перовскита**

В. Е. Анিকেева

Новосибирский государственный университет

Органоминеральные перовскиты, $MAPbX_3$ ($MA = CH_3NH_3^+$, $X = Cl, Br, I$), недавно привлекли внимание как перспективные материалы в солнечных элементах (СЭ), светодиодах, фотоприемниках и лазерах, что обусловлено следующими характеристиками: высокий коэффициент поглощения, длительное время жизни носителей заряда и оптимальное значение ширины запрещенной зоны. В частности, эффективность солнечных элементов на основе органоминеральных перовскитов достигла более чем 20 %. Существенно, что СЭ изготавливаются путем осаждения из растворов, и полученные перовскитные пленки обычно являются поликристаллическими. Однако, несмотря на возрастающий интерес к данному соединению, остаются вопросы о строении зонной структуры $CH_3NH_3PbI_3$. Основной целью работы является синтез поликристаллических пленок и монокристаллов органоминерального перовскита путем осаждения из растворов и изучение их оптических и фотоэлектрических свойств. Также исследована поверхность монокристаллов перовскита методом RHEED (дифракции быстрых электронов на отражение), проведено исследование состава кристалла методом РФЭС и получены спектры фотопроводимости монокристаллов $CH_3NH_3PbI_3$ в температурном диапазоне от 85 до 340 К. Спектральные измерения фототока показали, что известные структурные фазовые переходы в перовските $CH_3NH_3PbI_3$ хорошо проявляются и в температурной зависимости фотопроводимости. При температуре ниже 130 К перовскит, находясь в орторомбической фазе, имеет порог поглощения около 1,64 эВ, и в спектре фототока наблюдаются пики экситонного поглощения. Столь выраженные экситонные пики наблюдаются в соединении $CH_3NH_3PbI_3$ впервые, что может свидетельствовать о структурном совершенстве получаемых кристаллов.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. О. Е. Терещенко

Исследование туннельной проводимости тонких сверхпроводящих пленок в сильном магнитном поле

М. В. Бурдастых

Новосибирский государственный университет

Как известно, и куперовское, и кулоновское взаимодействия приводят к схожему эффекту — к подавлению плотности одночастичных состояний вблизи поверхности Ферми. Несмотря на важность исследования плотности состояний для понимания физики перехода сверхпроводник — изолятор, на сегодняшний день нет экспериментальных работ, в которых бы напрямую был выделен и учтен кулоновский вклад в формирование крайне необычных туннельных спектров сверхпроводящих пленок.

В данной работе была исследована туннельная проводимость сверхпроводящих пленок нитрида титана (TiN) при температурах ниже температуры перехода в сверхпроводящее состояние, но в сильном магнитном поле, то есть куперовское спаривание было полностью подавлено.

Показано, что в отличие от обычного металла, где плотность состояний вблизи поверхности Ферми можно считать постоянной, в пленках TiN с ростом беспорядка значительно возрастает роль кулоновского отталкивания. Усиливающиеся эффекты кулоновского взаимодействия приводят к температурно-зависимому подавлению плотности состояний вблизи уровня Ферми.

Работа выполнена при поддержке проекта РФФИ 18-32-00718 мол_а.

Научный руководитель работы — канд. физ.-мат. наук С. В. Постолова

Транспортные свойства пленки HgTe толщиной 1 мкм

Н. Н. Васильев

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Новосибирский государственный университет

Топологические изоляторы представляют собой новый класс материалов, отличительной особенностью которых является наличие поляризованных по спину поверхностных проводящих состояний [1]. Напряженные пленки HgTe толщиной более 70 нм являются представителями таких систем с объемной запрещенной зоной, где уже подтверждено наличие дираковских электронов и подробно изучены их транспортные свойства [2]. Однако до сих пор не изучено, как отсутствие щели энергетического спектра влияет на свойства поверхностных электронов трехмерных топологических изоляторов. Данная работа посвящена первому этапу изучения этого вопроса, а именно анализу транспортных свойств релаксированной бесщелевой пленки HgTe толщиной 1 мкм. Считается, что отсутствие запрещенной зоны в данной системе приведет к тому, что поверхностные электроны всегда будут сосуществовать на фоне объемных носителей.

Вначале был произведен подбор оптимальных параметров травления HgTe, роста диэлектрика и условий металлизации для снабжения структуры затвором, который позволял изменять положения уровня Ферми в системе. Далее при использовании полученных холловских мостиков были проведены измерения классического магнитотранспорта и его анализ на основе модели Друде [3]. В результате было показано, что в системе возможна реализация как электронной, так и смешанной электронно-дырочной проводимости с подвижностью поверхностных электронов до 2×10^5 см²/Вс. Также производится более подробный анализ поверхностных электронов на основе квантового транспорта изучаемой системы.

1. König M. et al. Science 318, 766. 2007.

2. Brüne C. et al. Phys. Rev. Let. 106, 126803, 2011.

3. Бонч-Бруевич В. Л., Калашиников С. Г. Физика. полупроводников. М.: Наука, 1977.

Научный руководитель — М. Л. Савченко

Методы контроля скорости напыления кремния и германия при МЛЭ

В. В. Дирко, В. А. Заяханов, К. В. Карева
Томский государственный университет

В настоящее время одним из основных методов получения наногетероструктур для оптоэлектроники является метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Формирование эпитаксиальных слоев невозможно без определения основных факторов, определяющих процессы синтеза.

Так использование кварцевого измерителя толщины (КИТ) позволяет измерения скорости роста и толщины растущего слоя, основанные на изменении собственной частоты кварцевого резонатора. Другим методом является метод дифракции быстрых электронов (ДБЭ). ДБЭ используется для контроля состояния поверхности подложки и растущего слоя и дает возможность судить о структуре поверхности по дифракционной картине на флуоресцентном экране.

Исследования гетероэпитаксиальных пленок проводится на установке X'Pert PRO MRD [4], в которой используется горизонтальный гониометр высокого разрешения, жесткая стабилизация позиций и система для измерений дифракции в плоскостях решетки, перпендикулярных типовой плоскости, что позволяет одновременно определить толщины выращенных слоев и содержание элементов Ge и Si в полученных методом МЛЭ образцах.

В работе были проведены серии экспериментов по напылению пленки Ge на подложку Si(100). Во время всего процесса проведения экспериментов с помощью видеокамеры регистрировалось изменение интенсивности картины дифракции. Также с помощью КИТ регистрировалось изменение собственной частоты кварцевого резонатора.

По полученным образцам на установке рентгеновской дифрактометрии определялись углы разориентации подложек, изучались кривые качания, снятые после ω -2 θ сканирования экспериментальных образцов. Проводилось компьютерное моделирование гетероструктур с опорой на результаты сканирования.

Таким образом, установлено, что использование нескольких методов позволяет более точно определять значения параметров синтеза наногетероструктур GeSi/Si для дальнейшего их практического использования при создании приборных устройств.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. А. П. Коханенко

**Исследование спектров комбинационного рассеяния света
двумерного MoS₂, синтезированного методом CVD**

Е. И. Захаркина, А. А. Семенова, Е. Ф. Боякинов
Северо-восточный федеральный университет
им. М. К. Аммосова, г. Якутск

После открытия графена наблюдается большой прогресс в получении других двумерных материалов. Сегодня одним из наиболее активно исследуемых материалов является дисульфид молибдена (MoS₂), который имеет уникальные механические, электрофизические и оптические свойства. Многослойный MoS₂ является полупроводником с непрямой запрещенной зоной, ширина которой 1,2 эВ. Однако наиболее интересные свойства проявляются при исследовании однослойного MoS₂, который является прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны, равной 1,8 эВ. Данные факты говорят о том, что достижения в этой области открывают новые возможности в создании новых нано- и оптоэлектронных приборов.

Целью данной работы является синтез двумерного MoS₂ методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) и исследование его спектров комбинационного рассеяния света.

В работе был проведен синтез двумерного MoS₂ методом CVD на поверхность SiO₂ в трехзонной трубчатой печи Nabertherm 80/750/RS. В качестве инертной среды во время осаждения был использован аргон. Для контролируемого синтеза были подобраны параметры: температура, время, давление, скорость подачи газа и концентрации исходных прекурсоров (MoO₃, S).

Проведенные измерения показали рост доменов MoS₂ в виде треугольников с латеральными размерами до 80 мкм. Анализ спектров комбинационного рассеяния света показал, что выращенные пленки представляют собой однослойный MoS₂. Для сравнения также были проведены измерения спектров КРС двухслойных и многослойных MoS₂. Разница частот между рамановскими пиками для однослойного MoS₂ равнялась 19 см⁻¹, для двухслойного — 21 см⁻¹, для многослойного — 25 см⁻¹. Получены вольт-амперные характеристики выращенного материала, на основании которого мы подтверждаем, что полученный материал является полупроводником.

Работа проведена в рамках госзадания МОН РФ «Ведущие исследователи на постоянной основе» №16.6824.2017/6.7.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доцент С. А. Смагулова

Электронные свойства монослоя MoS_2

Р. Н. Захаров, Е. П. Шарин
Северо-Восточный федеральный университет
им М. К. Аммосова физико-технический институт, г. Якутск

Дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) привлекают широкое внимание тем, что являются одним из наиболее перспективных материалов для устройств наноэлектроники, оптики и спинтроники благодаря своим необычным электронным и оптическим свойствам. Одним из наиболее изученных является MoS_2 , он демонстрирует хорошие электронные и транспортные свойства с наличием непрямой запрещенной зоны 1,2 эВ в многослойном варианте, тогда как монослой MoS_2 имеет прямую запрещенную зону в 1,8 эВ, высокую подвижность носителей заряда. Тот факт, что кристаллы данного состава могут быть расщеплены до монослоев, делает ДПМ крайне интересными материалами как с практической, так и с фундаментальной точки зрения. Данное семейство материалов демонстрирует широкий спектр электронных свойств: от диэлектрических до полупроводниковых, полуметаллических и металлических. Таким образом, данные материалы находят свое применение в различных областях науки и техники, таких как оптоэлектроника, фотовольтика, туннельная наноэлектроника, сенсорика и др.

В данной работе проведено исследование электронных свойств монослоя MoS_2 . Все исследования в работе проводили с использованием теории функционала электронной плотности (DFT), реализованной в рамках программного пакета Quantum Espresso. Обменно-корреляционная энергия учтена в приближении GGA. Энергия обрезания базиса атомных орбиталей была выбрана равной 50 Ry. Для обеспечения достаточной точности взят набор k-точек $12 \times 12 \times 1$ в двумерной зоне Бриллюэна исследуемой суперячейки согласно схеме Монхроста — Пака [1].

1. *Monkhorst H. J., Pack J. D.* Special points for Brillouin-zone integrations // Phys. Rev. B. 1976. V. 13. P. 5188–5192.

Получение приповерхностных слоев Mn-Zn ферритов с повышенной электропроводностью при электронном и лазерном воздействии

В. В. Каранский, В. К. Олицкий
Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники

Быстрый темп развития электроники предъявляет высокие требования к параметрам и характеристикам существующих материалов. В связи с этим возникает потребность в улучшении их свойств. Для создания элементной базы электроники на сегодняшний день существует огромный перечень материалов, среди которых особое место занимают ферриты. За счет того, что ферриты имеют высокое значение магнитной проницаемости и обладают полупроводниковыми свойствами, становится возможным их использование в промышленности радиочастотного и СВЧ-диапазона [1, 2]. Среди многообразия свойств ферритов большое значение уделяется электрофизическим параметрам, таким как электропроводность и концентрация донорных центров, при этом при конструировании ферритовых изделий важно значение их электропроводности. Наиболее перспективными для исследований являются марганец-цинковые ферриты структуры шпинели нестехиометрического состава, используемые для создания элементной базы спинтроники. Известно, что электрофизические параметры ферритов зависят от их микро- и наноструктуры. Эффективными способами управления микроструктурой является электронное и лазерное воздействие.

Цель данной работы — получение приповерхностных слоев Mn-Zn ферритов с повышенным значением электропроводности при воздействии электронного и лазерного излучения.

В качестве объектов исследования были выбраны Mn-Zn ферриты марки НМ700 и НМ2000, имеющие химический состав $Mn_{0,6}Zn_{0,4}Fe_2O_3$.

В результате электронного воздействия удалось получить приповерхностные слои со значением электропроводности $80 \text{ (Ом}\cdot\text{м)}^{-1}$, что на три порядка превышает паспортное значение. При воздействии лазерного излучения получились слои со значением электропроводности $0,12 \text{ (Ом}\cdot\text{см)}^{-1}$, что в 2,4 раза больше паспортного значения. Таким образом, электронное и лазерное воздействие являются эффективными способами повышения электропроводности Mn-Zn ферритов.

1. Smit J., Verweel J. Ferrites at radio frequencies. New York: McGraw-Hill, 1971.

2. Muralidharan S., Saraswathy V., Berchmans L. J., Thangavel K., Ann K. Y. Nickel ferrite ($NiFe_2O_4$): A possible candidate material as reference electrode for corrosion monitoring of steel in concrete environments. Chemical, 2010.

Научный руководитель — д-р тех. наук, проф. С. В. Смирнов

Исследование структурных и электрических свойств мультиграфена в зависимости от степени функционализации

А. С. Кашеев

Новосибирский государственный университет

Большой интерес к материалам на основе графена связан с такими его свойствами, как высокая подвижность носителей заряда, высокий коэффициент теплопроводности, большая прочность на разрыв. В связи с тем, что закон дисперсии носителей заряда в графене является бесщелевым, применение этого материала в транзисторных структурах осложнено. Таким образом, возникают задачи по поиску способов модификации графена, в которых наряду с сохранением высокой подвижности носителей заряда открывалась бы щель в спектре. В данном направлении ведутся исследования по функционализации графена, и на сегодняшний день известны такие диэлектрические производные графена, как окисленный, гидрированный, фторированный графен. Последний материал является объектом наших исследований, поскольку является наиболее термически и химически стабильным соединением.

В ИФП СО РАН в последние годы был разработан метод по химической функционализации графена в водном растворе плавиковой кислоты [1]. Однако в предложенном методе процесс фторирования не является полностью контролируемым, и необходим поиск механизмов, позволяющих влиять на степень функционализации. Целью данной работы является создание пленок графена и мультиграфена с запрещенной зоной и с высокими значениями подвижности.

Были исследованы электрические и структурные свойства частично фторированных пленок графена и мультиграфена. Исследованные образцы были получены методами CVD и электростатического отщепления. Характерные латеральные размеры пленок мультиграфена составляли 10–50 мкм, а толщина ~0,5–3 нм. Путем фторирования пленок в 1 % HF-растворе были получены пленки частично фторированного графена с малой степенью фторирования и запрещенной зоной ~0,01 эВ. Сопротивление пленок в низкоомном состоянии составляло ~1 кОм, а в высокоомном ~10⁶ Ом. Подвижность пленок составляла ~1500 см²/В*с и в процессе фторирования сохранялась.

1. Небогатикова Н. А. и др. Функционализация пленок графена и мультиграфена в водном растворе плавиковой кислоты // Российские нанотехнологии. 2014. Т. 9. № 1–2. С. 59–65.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Н. А. Небогатикова

МЛЭ слоев InAlAs на подложке (001)InP

Д. А. Колосовский

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Новосибирский государственный университет

В рамках создания мощных СВЧ-фотодиодов телекоммуникационного диапазона было предложено использовать гетероструктуры InAlAs/InGaAs на подложке (001)InP. Для таких структур было предсказано уменьшение шума, увеличение отношения сигнал — шум и улучшение температурной стабильности. Однако было показано, что в таких структурах наблюдаются высокие темновые токи. Значительные уровни темнового тока и шума объясняются межзонным туннелированием в InAlAs слое из-за наличия в запрещенной зоне материала уровней дефектов или неконтролируемых примесей. Таким образом, для реализации предсказанных преимуществ структур InAlAs/InGaAs/InP необходима оптимизация технологии выращивания алюминий-содержащего слоя для получения низких концентраций центров, обуславливающих межзонное туннелирование носителей.

На сегодняшний день нет общепринятой технологии МЛЭ слоев InAlAs на подложке InP. Ряд авторов указывает оптимальные температуры роста 530 °С и ниже, однако существуют работы, где наилучшие структурные свойства слоев были получены при температуре подложки 600 °С.

В работе исследованы свойства слоев, выращенных в широком диапазоне условий роста. Температура подложки варьировалась в диапазоне 480–580 °С. Поток мышьяка варьировался в диапазоне $5 \times 10^{-6} - 8 \times 10^{-5}$ Торр.

Критичным параметром при синтезе таких структур является получение и контроль точного состава твердого раствора. При отклонении от решеточно-согласованного состава, $x = 0,52$, более чем на 1 % в слоях наблюдались точечные дефекты и дислокации.

В работе показано, что наилучшие структурные свойства слоев InAlAs получаются при росте в диапазоне температур 500–510 °С и потоке мышьяка порядка 2×10^{-5} Торр. На АСМ-картинах таких слоев видны моноатомные ступени, среднеквадратичное значение шероховатости не превышает 0,6 нм. Спектры низкотемпературной фотолуминесценции таких слоев содержат единственную полосу, обусловленную межзонными переходами.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00548.

Научные руководители — д-р физ.-мат. наук К. С. Журавлев,
Д. В. Дмитриев

Изучение процессов фотоэмиссии и инжекции свободных электронов в полупроводниковые гетероструктуры

Я. В. Кудлаев

Новосибирский государственный университет

Фотокатоды на основе полупроводниковых гетероструктур с отрицательным электронным средством (ОЭС) используются в ФЭУ, ЭОП и источниках холодных, в том числе поляризованных по спину, электронов. Также известно, что при инжекции свободных электронов в GaAs с ОЭС возникает катодолюминесценция (КЛ), величина циркулярной поляризации которой зависит от поляризации инжектируемых электронов по спину [1]. Отсюда возникает идея создания двумерного детектора спина свободных электронов на основе планарной полупроводниковой гетероструктуры с ОЭС, в котором, измеряя пространственное распределение интенсивности и поляризации КЛ, можно определить распределение электронов и их поляризацию по спину в сечении инжектируемого пучка.

Для изучения эмиссии и инжекции поляризованных по спину электронов можно использовать вакуумный фотодиод с фотокатодом GaAs/(Cs,O) с ОЭС в качестве источника электронов и анодом AlGaAs с квантовыми ямами GaAs в качестве детектора электронов [2]. Сфокусированное лазерное излучение возбуждает в катод фотоэлектроны, эмитируемые в вакуум с пространственным распределением, которому соответствует картина фотолюминесценции (ФЛ) в фотокатод. Затем электроны под действием ускоряющего потенциала преодолевают вакуумный зазор и инжектируются в анод, при этом картина возникающей КЛ соответствует распределению электронов вблизи анода. Отличие картин ФЛ и КЛ в общем случае обусловлено наличием исходных угловой и энергетической дисперсий фотоэлектронов, эмитированных из GaAs с ОЭС, определение которых представляет собой научный интерес. Целью работы являлось установление влияния на получаемые профили картин КЛ угловых распределения эмитированных электронов.

Установлено влияние ускоряющего напряжения на ширину профиля КЛ. Обнаружено, что пространственное распределение электронов на аноде соответствует углу вылета фотоэлектронов из фотокатода $\sim 15^\circ$.

1. *Alperovich V. L. et al.* Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A 536, 302 (2005).

2. *Rodionov A. A. et al.* Phys. Rev. Applied 8, 034026 (2017).

Получение тонких пленок Bi_2Se_3 для ван-дер-ваальсовых гетероструктур

Д. А. Кустов

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Новосибирский государственный университет

Селенид висмута (Bi_2Se_3) обладает свойствами топологического изолятора — состояния вещества с проводящими поляризованными по спину состояниями на поверхности, поэтому структуры на его основе интересны для спинтроники и квантовых вычислений. Bi_2Se_3 представляет собой узкозонный полупроводник ($E_g \sim 0,25\text{--}0,35$ эВ). Это означает, что при комнатной температуре присутствует вклад объема в проводимость. Одним из предполагаемых способов уменьшения объемного вклада является создание гетероструктур на основе тонких пленок.

Кристаллическая структура Bi_2Se_3 представляет собой чередующиеся слои Bi и Se, где пятерки слоев Se-Bi-Se-Bi-Se (толщина 1 нм) связаны между собой ван-дер-ваальсовыми силами, следовательно, для создания тонких пленок и гетероструктур на их основе могут быть использованы такие же методы, как и для графена. Этими методами являются электрохимическое и механическое расслоение объемных кристаллов.

Целью работы является создание тонких пленок на основе Bi_2Se_3 и определение их электрических и структурных свойств. Было использовано электрохимическое и механическое расслоение, полученные пленки переносились на кремниевые подложки со слоем SiO_2 толщиной 300 нм. Свойства поверхности были исследованы с помощью атомно-силовой микроскопии и комбинационного рассеяния света. Для измерения электрических свойств с помощью проводящей пасты были нанесены проводящие контакты. Была получена зависимость проводимости от толщины и подвижность носителей в различных образцах.

Были получены пленки с характерными размерами 10–100 мкм и толщинами 2–10 нм. Характерные значения сопротивления для тонких пленок составляют 4–5 кОм/кв (в случае объемных кристаллов ~50 Ом/кв) и подвижность носителей заряда, определенная из передаточных характеристик, измеренных с использованием кремниевой подложки в качестве затвора, составила 10–50 $\text{см}^2/\text{Вс}$.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук И. В. Антонова

**Магнетосопротивление высокоподвижного
двумерного электронного газа со сверхрешеткой антиточек**

А. С. Литвинцев

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Новосибирский государственный университет

Квазиклассический и квантовый транспорт в двумерном электронном газе (ДЭГ) с решеткой антиточек является предметом неослабевающего внимания вот уже почти тридцать лет. Это связано с тем, что указанная система обладает целым рядом интереснейших свойств, обусловленных как классическим, так и квантовым хаосом. Не менее важен и тот факт, что наиболее ярко они проявляется в достаточно просто измеряемом транспортном отклике системы, который демонстрирует целый ряд интересных явлений: соизмеримые пики магнетосопротивления, обусловленные формированием в магнитном поле островков устойчивости в море хаоса, осцилляций Ааронова — Бома на хаотических электронных траекториях, эффект квантования орбит, гигантское отрицательное магнетосопротивление, обусловленное эффектами памяти и др. Степень выраженности тех или иных эффектов определяется соотношением характерных величин, определяющих свойства сверхрешетки антиточек и ДЭГ, на основе которого создается исследуемая сверхрешетка. К таким величинам относятся прежде всего транспортная длина свободного пробега электронов, период сверхрешетки и размер антиточки.

Существенным является тот факт, что рост качества ДЭГ, выражаемого в росте длины свободного пробега, и качества сверхрешеток, выражаемого, в свою очередь, в уменьшении размеров антиточек и их периода, происходил одновременно. В результате сложилась парадоксальная ситуация, в которой сверхрешетки антиточек с большим периодом, изготовленные на основе ДЭГ с высокой подвижностью и длиной пробега, практически не изучались. Данная работа посвящена этой области. Был изучен транспортный отклик сверхрешетки антиточек с периодом 1–2 мкм, изготовленный на основе ДЭГ в гетеропереходе AlGaAs/GaAs с концентрацией $n_{2D} = 6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и подвижностью $\mu = 3 \cdot 10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Были исследованы образцы с различным диаметром антиточек и глубиной травления. Построена зонная диаграмма исследуемых образцов.

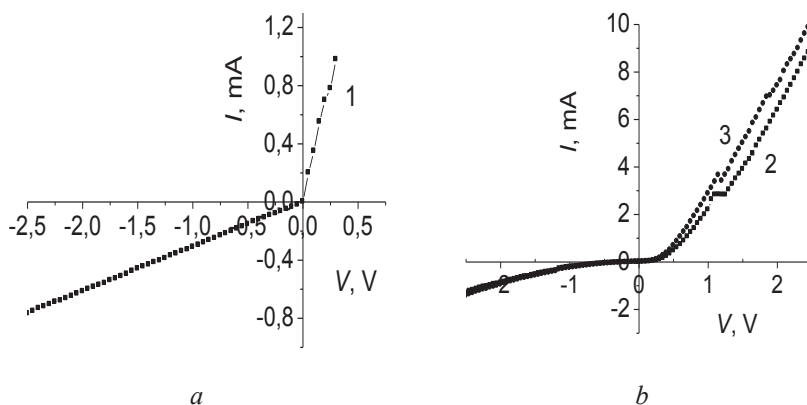
Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук Д. А. Козлов

Изучение ВАХ полученного пятикратно переплавкой металлургического кремния на солнечной печи

Ш. Т. Маншуров

Алмалыкский филиал Ташкентского государственного
технического университета им. И. Каримова

Нами были исследованы вольт-амперные характеристики этих структур с обычными омическими контактами. Результаты представлены на рисунке. Видно, что при температуре 30 °С появляются выпрямляющие свойства, подобно тому, как это отмечалось в [1] для структур, изготовленных из восьмикратно переплавленного кремния.



Вольт-амперные характеристики n-Si-структуры с омическими контактами, изготовленной из пятикратно солнечно-переплавленного технического кремния при различных температурах: кривые 1 — 30 °С (а); 2 — 50 °С, 3 — 100 °С (б)

Проведенные исследования показывают, что распределение всех без исключения примесей носит не просто неравномерный, но в той или иной степени периодический характер.

1. Булярский С. В., Фистуль В. И. Термодинамика и кинетика взаимодействующих дефектов в полупроводниках. М.: Наука. 1997. 393 с.

Научные руководители — д-р физ.-мат. наук, проф. А. С. Саидов,
д-р физ.-мат. наук, проф. А. Ю. Лейдерман

**Исследование оптических свойств кристаллов
органоминерального перовскита**

М. А. Машарин

Институт физики полупроводников
им. А. В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск,
Новосибирский государственный университет

Солнечный свет является самым распространенным источником возобновляемой энергии. Именно поэтому поиск новых материалов и разработка конструкций солнечных элементов остаются актуальными. Средняя стоимость фотовольтаических преобразователей постепенно снижается, а максимальный КПД растет. В последнее время исследователи рассматривают органоминеральный перовскит как наиболее перспективный материал для использования в тонкопленочных солнечных элементах. На сегодняшний день максимальный КПД на основе полупроводникового перовскита равен 22 % [1].

В данной работе представлено исследование оптических свойств и структуры кристаллов органоминерального перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$. Синтез кристаллов перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ проводился из растворов по специально разработанной методике. Выполнено измерение обзорного РФЭ спектра поверхности монокристалла и подтвержден химический состав. Структурные особенности кристалла изучены с помощью дифракции синхротронного рентгеновского излучения в интервале температур 310–330 К. Проведены исследования фотолюминесценции в диапазоне температур 10–360 К. Для возбуждения фотолюминесценции использовался Nd:YAG лазер непрерывного действия Ventus-500 с длиной волны излучения 532 нм. Исследуемый образец размещался в вакууме в гелиевом криостате замкнутого цикла Janis M22 с диапазоном перестройки температур 8–300 К.

Полученные структурные данные и результаты по фотолюминесценции монокристаллов свидетельствуют о фазовом переходе из орторомбической фазы в тетрагональную при 155 К, и о фазовом переходе из тетрагональной фазы в кубическую при 315 К, что согласуется с литературными данными.

1. *Woon Seok Yang*. Iodide management in formamidinium-lead-halide-based perovskite layers for efficient solar cells // *Science* 356(6345), 2017. P. 1376–1379.

Научный руководитель — канд. хим. наук О. И. Семенова

ИК-спектроскопия локализованных поверхностных плазмонных колебаний в массивах нано- и микроантенн

И. А. Милёхин

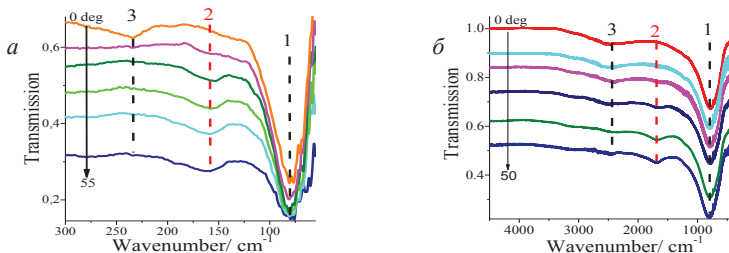
Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Новосибирский государственный университет

Нано- и микроантенны перспективны для использования в химических или биологических сенсорах с целью получения оптического отклика от микроскопических количеств органических и неорганических веществ.

Цель данной работы — исследование спектра и определение анизотропии локализованных поверхностных плазмонных (ЛПП) колебаний в массивах антенн Au среднего и дальнего ИК-диапазонов.

Массивы наноантенн размером $3 \times 3 \text{ мкм}^2$ были изготовлены с помощью сфокусированного электронного пучка, а массивы микроантенн были сформированы методом фотолитографии на подложке Si.

ИК-спектры пропускания массивов наноантенн Au проявляют ярко выраженные минимумы, соответствующие поглощению нечетными, диполь-активными плазмонными модами. На фоне поглощения нечетных мод ЛПП экспериментально показано, что с увеличением угла падения света на образец наблюдается возрастание интенсивности четных мод ЛПП как для микроантенн (а), так и для наноантенн (б).



ИК-спектры массивов микроантенн (а) и наноантенн (б),
записанные при разных углах падения света.

Номера мод ЛПП и направление изменения угла падения показаны на рисунке

3D-электродинамическое моделирование, выполненное в программном пакете ANSYS HFSS™ v15, показало, что активация четных плазмонных мод в ИК-спектрах, записанных в наклонном падении света на образец, возникает вследствие возникновения некомпенсированного дипольного момента, вызванного набегом фазы.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, доцент О. Е. Терещенко

Изучение углового распределения фотоэмитированных электронов из GaAs с эффективным отрицательным средством

Н. А. Назаров

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Новосибирский государственный университет

Из хорошо известного ряда полупроводников и полупроводниковых соединений, например GaAs, возможна фотоэмиссия термализованных электронов при условии, что уровень вакуума оказывается ниже дна зоны проводимости, в состоянии так называемого эффективного отрицательного электронного средства (ОЭС). В отличие от прямой фотоэмиссии, когда сохраняется импульс и энергия эмитированного электрона, фотовозбужденные электроны в зону проводимости GaAs успевают рассеяться по импульсу и термализоваться до выхода в вакуум, т. е. потерять информацию о начальном состоянии в валентной зоне ($E_i(k)$). Однако прежде чем выйти в вакуум, электроны попадают в двумерную квантовую яму, образованную поверхностной областью пространственного заряда, и эмиссия электронов осуществляется с уровней размерного квантования. При этом переходы между уровнями размерного квантования происходят через электрон-фононное взаимодействие с последующей эмиссией электрона в вакуум. Таким образом, угловое распределение эмитированных электронов несет информацию только о конечных состояниях в кристалле. Для изучения процесса эмиссии нами был собран вакуумный фотодиод, в котором оба электрода являлись полупроводниковыми гетероструктурами с ОЭС. Это позволило выявить и изучить ряд новых интересных фотоэмиссионных и инжекционных свойств электронов низкой энергии (0–300 мэВ). Измерены энергетические распределения фотоэмитированных электронов. Подтверждено наличие тонкой структуры в фотоэмиссионных спектрах, связанной с рассеянием электронов на оптических фонах при выходе в вакуум через квантово-размерные состояния в ОПЗ. Измерено угловое распределение эмитированных электронов. В работе проведено сравнение расчета с экспериментально полученными профилями катодolumинесценции. Для различных параметров теоретической кривой были подобраны значения параметров, которые дают наилучшее совпадение с экспериментом. В работе обсуждаются модели упругой эмиссии и с учетом рассеяния в области пространственного заряда.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук О. Е. Терещенко

Изучение упругих деформаций в гетероструктурах Ge на структурированных подложках Si методом молекулярной динамики

И. А. Насибулов

Новосибирский государственный университет

Одной из приоритетных задач в области материаловедения является создание пространственно упорядоченных массивов полупроводниковых квантовых точек (КТ). Эти квазиуменьшенные системы обладают замечательными физическими свойствами и могут получить применение в электронных приборах и устройствах, таких как светодиоды, лазеры на КТ, спинтронная память и логические элементы для квантовых вычислений. Одним из методов получения пространственно упорядоченных массивов КТ является молекулярно-лучевая эпитаксия на структурированных подложках, т. е. на подложках, поверхность которых содержит систему упорядоченных ямок или канавок, сформированных с помощью литографии. Углубления служат местами преимущественного зарождения КТ при последующей гетероэпитаксии. Механизм роста на поверхности со сложным рельефом недостаточно изучен. В данной работе методом молекулярной динамики рассчитаны упругие деформации, обусловленные дефектами, образованными ионным облучением. Построена карта потенциального рельефа для ямки в форме перевернутой усеченной пирамиды. Результаты выполненных расчетов сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук П. Л. Новиков

Высокотемпературный отжиг легированных и нелегированных гетероструктур с квантовыми точками, сформированными в анионной и катионной подрешетках AlAs

В. Е. Никифоров

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Новосибирский государственный университет

В структурах с непрямозонными квантовыми точками (КТ) первого рода требование на выполнение закона сохранения квазиимпульса при излучательной рекомбинации приводит к увеличению времени жизни экситона вплоть до ~ 10 нс, что значительно превосходит время жизни экситона в прямозонных КТ первого рода (~ 1 пс). Предыдущие исследования показали, что время жизни экситона можно еще увеличить (вплоть до миллисекунд), размывая гетерограницу КТ / матрица. Размывать гетерограницу КТ / матрица можно, вызывая диффузию материалов посредством высокотемпературного послеростового отжига (ВПО). Однако предварительные эксперименты показали, что это не работает, например, для р-легированных гетероструктур с КТ, ВПО которых не размывает гетерограницу, и время жизни экситонов после отжига в таких структурах практически не изменяется.

Цель работы — выяснить, почему легирование влияет на диффузию материалов в InAs/AlAs и AlSb/AlAs — структурах с квантовыми точками при высокотемпературном отжиге.

ВПО, вызывая диффузию материалов, меняет состав и размеры КТ и, соответственно, ее энергетическое строение. Таким образом, по относительному смещению полосы ФЛ КТ можно качественно судить о процессах диффузии. Экспериментальное исследование энергетического строения КТ было проведено методом стационарной низкотемпературной ФЛ. Анализировалось смещение полосы ФЛ в зависимости от температуры отжига. Было показано, что процессы диффузии проходят по вакансионному механизму, и вакансии образуются не рядом с КТ, а мигрируют из объема гетероструктур. Было обнаружено, что п-легированные области препятствуют миграции вакансий. Показано, что при фиксированных температуре и времени отжига степень перемешивания материалов определяется изменением вероятности образования вакансий элементов III или V группы (в структурах InAs/AlAs и AlSb/AlAs соответственно) при изменении положения уровня Ферми.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук Т. С. Шамирзаев

Термохимическое моделирование реакции образования гидратов аргона

Д. С. Попова, Д. В. Федорова, В. Ю. Амельчукова
Новосибирский государственный технический университет,
Новосибирский государственный университет

Аргон входит в состав атмосферного воздуха, поэтому исследование условий образования клатратных гидратов аргона представляет практический интерес. В работе изучались молекулярные кластеры на основе клатратных гидратов с целью моделирования процесса образования больших и малых полостей клатратных гидратов аргона. Получены равновесные расстояния, энергии для всех рассматриваемых полостей.

Все структуры клатратных гидратов, 5^{12} , $5^{12}6^2$ и $5^{12}6^4$ с и без молекул Ar ($\text{Ar}/2\text{Ar}@5^{12}$; $1\text{Ar}/2\text{Ar}/3\text{Ar}@5^{12}6^2$; $1\text{Ar}/2\text{Ar}/3\text{Ar}5^{12}6^4$) в качестве молекул гостей, рассматриваемые в данном исследовании, оптимизированы с помощью гибридного потенциала метода функционала электронной плотности (DFT) B3LYP в сочетании с 6-311G базисом. При геометрической оптимизации клатратных структур были заморожены длины связи O-H и угол H-O-H молекул воды находящихся в каркасе клатратного гидрата. Все электронные расчеты были проведены с помощью пакета программ Gaussian 09.

На предмет термохимического анализа были подробно рассмотрены вышеуказанные кластеры, являющиеся структурными составляющими клатратных гидратов КС-I и КС-II. Реакция образования полостей гидратов моделировалась при термодинамических условиях образования гидратов аргона. Из анализа изменения энергии Гиббса, энтальпии и энтропии получены данные о том, какой процесс, протекающий с заполнением больших и малых полостей гидратов аргона, протекает самопроизвольно, что подтверждается экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №18-08-00803.

Научный руководители — д-р физ.-мат. наук, доцент А. П. Калинина,
канд. физ.-мат. наук Ю. Ю. Божко

Синтез допированных азотом алмазных пленок методом плазмохимического осаждения из газовой фазы

И. А. Самусов

Институт неорганической химии
им. А. В. Николаева СО РАН, г. Новосибирск

Алмаз, благодаря своим уникальным физико-химическим свойствам, таким как высокая твердость, химическая инертность, износостойкость, высокая теплопроводность, имеет широкое применение в различных областях науки и техники. Как оказалось, легирование азотом алмаза приводит к встраиванию атомов азота в структуру алмаза и изменению проводимости и оптических свойств. Благодаря этому легированный азотом алмаз может использоваться в качестве эмиттера в различных устройствах, а также открывает новые пути развития микро- и нанoeлектроники.

Методом плазмохимического газофазного осаждения (PE CVD) на кремниевых подложках были выращены алмазные пленки с разным значением концентрации азота во время синтеза при различной мощности подаваемого СВЧ-излучения, возбуждающего плазму. Рост алмазных пленок осуществлялся в микроволновом плазменном реакторе пониженного давления без автономного подогрева подложки. Генерация плазмы осуществлялась микроволновым излучением частотой 2,45 ГГц мощностью 5 кВт. Рабочее давление в камере составляло 120 Тор. Основным плазмообразующим газом служил водород. В качестве углеродосодержащего газа использовался пентан.

Было исследовано влияние азота на морфологию алмазных пленок. По результатам анализа снимков РЭМ, спектров фотолюминесценции, КРС и XPS было установлено, что добавление азота (при потоке 20–30 мл/мин) во время синтеза приводит к уменьшению зерна кристаллита алмазной пленки, что связано со встраиванием азота в структуру алмаза, и появлению дополнительных дефектов структуры. При исследовании фотолюминесценции (ФЛ) в образцах, во время роста которых азот не добавлялся, была обнаружена широкая полоса фотолюминесценции с максимумом 500 нм. Однако в спектрах образцов, полученных при потоке азота 30 мл/мин, данная полоса не наблюдалась, что, вероятнее всего, связано с большим количеством дефектов в структуре алмазных пленок.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, проф. А. В. Окотруб

Синтез и исследование структурных свойств MoS₂

А. А. Семенова, Е. И. Захаркина, Е. Ф. Боякинов
Северо-восточный федеральный университет
им. М. К. Аммосова, г. Якутск

Дихалькогениды переходных металлов имеют слоистую структуру с сильными связями внутри слоев и слабыми ван-дер-ваальсовыми взаимодействиями между слоями. Однослойный MoS₂ является полупроводником с прямой запрещенной зоной (1,8 эВ) [1]. Эти двумерные материалы обладают рядом уникальных свойств: высокая механическая прочность, прозрачность (98 %), гибкость. В связи с этим синтез и исследование структур дихалькогенидов переходных металлов является перспективной задачей и открывает возможности для создания солнечных элементов.

Цель данной работы — синтез и исследование структурных свойств двумерного MoS₂.

Для роста MoS₂ использовался метод химического осаждения из газовой фазы (CVD) на поверхность SiO₂. Поверхность SiO₂ была обработана химическим и плазмохимическим методом. Синтез пленок проводился при температуре 700 °С, при атмосферном давлении в течение 20 минут, скорость потока Ar составляла 25 см³/мин. Ar использовался в качестве инертной среды. Количество исходных прекурсоров бралось в соотношении 1:13 MoO₃ (17 г) и S (220 г). Подложки SiO₂ располагались над порошком MoO₃ и возле тигля с порошком. Расположение тиглей: сера 18 см, MoO₃ с подложками 27 см.

Исследованы структурные свойства полученных пленок двумерного MoS₂ методами оптической, атомно-силовой, сканирующей электронной микроскопии и элементного анализа.

Результаты измерений на оптическом и электронном микроскопах показали рост доменов MoS₂ в виде треугольников с латеральными размерами до 80 мкм. На атомно-силовом микроскопе были измерены толщины доменов, которые равны 0,8–0,9 нм. Элементный анализ выявил содержание атомов молибдена (0,19 ат. %), и серы. (0,48 ат. %).

Работа проведена в рамках госзадания МОН РФ «Ведущие исследователи на постоянной основе № 16.6824.2017/6.7

1. *Splendiani A., Sun L., Zhang, Y., Li T., Kim J., Chim C.-Y., Galli G., Wang F.* Emerging Photoluminescence in Monolayer MoS₂. *Nano Lett.* 2010, 10, P. 1271–1275.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доцент С. А. Смагулова

Реконструкционные фазовые переходы на поверхности InAlSb

М. А. Суханов

Новосибирский государственный университет

В МЛЭ поверхность (100) InSb, как правило, находится в условиях стабилизации сурьмой. Таким условиям соответствуют поверхностные реконструкции $c(4 \times 4)$ и (1×3) . Переход одной реконструкции в другую происходит при вариации потока сурьмы или температуры подложки.

В данной работе были изучены поверхностные реконструкции InSb, InAlSb методом дифракции быстрых электронов на отражение. Переход $c(4 \times 4)$ - (1×3) был изучен детально. Поверхностная реконструкция $c(4 \times 4)$ имеет место при избытке сурьмы, соответственно увеличение температуры или уменьшение потока сурьмы приводит к десорбции атомов сурьмы. В итоге возникает ассиметричная реконструкция (1×3) . В эксперименте регистрировалась эволюция интенсивности дробного рефлекса $(0 \ 3/2)$ в процессе изменения потока сурьмы при заданных температурах подложки. При температуре подложки ниже критической наблюдается гистерезис в поведении интенсивности дробного рефлекса при увеличении либо уменьшении потока Sb. При температуре подложки выше критической гистерезис не наблюдался. Реконструкционный переход $c(4 \times 4)$ - (1×3) описан в рамках модели решеточного газа адатомов Sb.

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук А. К. Бакаров

**Низкоомные омические контакты
с боковым диффузионным барьером на основе пленок
тугоплавких металлов к эпитаксиальным гетероструктурам
на основе GaAs**

И. В. Федин

Томский государственный университет
систем управления и радиоэлектроники

Частотные, шумовые, усилительные и надежность характеристики GaAs СВЧ-монокристаллических интегральных схем (МИС) в значительной степени определяются параметрами транзисторов и, в частности, сопротивлением и термостабильностью омических контактов к областям истока и стока, а также морфологией поверхности и края контактных площадок. Одним из способов улучшения характеристик транзисторов является улучшение комплекса параметров омических контактов.

В работах Cheun-Wei Chang (2008 г.) впервые показано, что использование в составе омического контакта на основе композиции Ge/Au/Ni/Ti/Au планарного диффузионного барьера на основе пленки титана (Ti), формируемой методом электронно-лучевого испарения в вакууме, позволяет уменьшить величину приведенного контактного сопротивления, а также увеличить термостабильность морфологии края контактной площадки.

В работе установлено, что одновременное использование планарного и бокового (торцевого) диффузионных барьеров на основе пленок тугоплавких металлов, сформированных методом магнетронного распыления, позволяет дополнительно уменьшить величину приведенного контактного сопротивления омических контактов, а также повысить термическую стабильность морфологии края контактной площадки.

Наблюдаемые эффекты обусловлены ограничением диффузии атомов верхней пленки проводника на основе золота (Au) по боковой поверхности контактной площадки и, как следствие, отсутствием взаимодействия верхнего слоя металла с нижележащими слоями эпитаксиальной гетероструктуры на основе GaAs.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Соглашение № 14.577.21.0250 от 26.09.17). Уникальный идентификатор проекта RFMEFI57717X0250.

Научный руководитель — канд. тех. наук Е. В. Ерофеев

Моделирование свойств гидратов озона DFT-методами

Д. В. Федорова, В. Ю. Амельчукова, Д. С. Попова
Новосибирский государственный технический университет,
Новосибирский государственный университет

Озон даже при низких температурах имеет тенденцию к самопроизвольному взрывному распаду. Однако в присутствии соединений-помощников при определенных условиях могут образовываться озоносодержащие газовые гидраты. На данный момент перспективным методом хранения полученного озона является его консервация в форме газовых гидратов.

В работе изучались молекулярные кластеры на основе клатратных гидратов КС-I, КС-II с целью моделирования больших и малых полостей клатратных гидратов озона. Получены равновесные расстояния, электронная плотность энергии стабилизации для всех рассматриваемых систем.

Все структуры клатратных гидратов, 5^{12} , $5^{12}6^2$ и $5^{12}6^4$ с и без молекул O_3 ($O_3@5^{12}$; $1O_3@5^{12}6^2$; $1O_3@5^{12}6^4$), в качестве молекул гостей, рассматриваемые в данном исследовании, оптимизированы с помощью гибридного потенциала метода функционала электронной плотности (DFT) B3LYP в сочетании с 6-311G базисом. При геометрической оптимизации клатратных структур были заморожены длины связи O-H и угол H-O-H молекул воды, находящихся в каркасе клатратного гидрата. Все электронные расчеты были проведены с помощью пакета программ Gaussian 09.

Подробно были рассмотрены вышеуказанные кластеры, являющиеся структурными составляющими клатратных гидратов КС-I и КС-II, на предмет их энергии стабилизации, распределения электронной плотности. Структуры полостей гидратов моделировалась при термодинамических условиях образования гидратов озона ($P = 0,5-1$ МПа, $T = 273$ К). Получены термодинамические данные (энергия Гиббса, энтальпия и энтропия) о реакции образования больших и малых полостей гидратов озона.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ №18-08-00803.

Научные руководители — д-р физ.-мат. наук, доцент А. П. Калинина,
канд. физ.-мат. наук Ю. Ю. Божко

Температурная зависимость фотоэмиссии из GaAs(Cs,O) при различных составах адсорбционного покрытия

В. С. Хорошилов

Новосибирский государственный университет

Поверхности полупроводников с относительно небольшим положительным электронным сродством в последнее время привлекают внимание в связи с возможностью создания новых преобразователей солнечной энергии, более эффективных, чем имеющиеся преобразователи на $p-n$ переходах. Повышение эффективности может быть достигнуто за счет использования «фотонно-усиленной термоэлектронной эмиссии», то есть эмиссии электронов, рожденных светом ниже уровня вакуума, связанной с их последующей термализацией вверх по энергии при взаимодействии с нагретой кристаллической решеткой. Поверхность Cs/GaAs перспективна для создания таких преобразователей благодаря оптимальной ширине запрещенной зоны и возможности задать требуемую величину электронного сродства. Использование этой поверхности осложняется нестабильностью электронного сродства при повышенных температурах [1]. Решением этой проблемы может оказаться использование поверхности GaAs(Cs,O) ввиду того, что небольшие дозы кислорода, нанесенные на поверхность Cs/GaAs, способствуют увеличению энергии связи атомов цезия. С целью исследования термостабильности GaAs(Cs,O) были получены температурные зависимости электронного сродства и вероятности выхода электронов в вакуум для различных (Cs,O)-покрытий, нанесенных на поверхность GaAs при комнатной температуре. Сродство и вероятность выхода измерялись методом спектроскопии квантового выхода фотоэмиссии при нагревании полученных поверхностей 120 °С и их последующем остывании до комнатной температуры. Было показано, что нанесенные покрытия все еще нестабильны — после термодублирования сродство и вероятности выхода оказались отличными от начальных значений, но при этом величина их изменения меньше (в ~ 3 раза), чем на поверхности Cs/GaAs без кислорода. Таким образом, установлено, что благодаря наличию кислорода поверхности GaAs(Cs,O) действительно обладают более стабильными эмиссионными свойствами, чем Cs/GaAs.

1. Zhuravlev A. G., Alperovich V. L. Temperature dependence of photon-enhanced thermionic emission from GaAs surface with nonequilibrium Cs overlayers // Appl. Surf. Sci. 2017. V. 395, 3. P. 3–8.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук А. Г. Журавлев

**Нанокристаллы германия в пленках SiO_x:
получение, структура и оптические свойства**

Чжан Жуй

Новосибирский государственный университет

Нанокристаллы (НК) германия в диэлектрических пленках представляют собой квантовые точки. Они интересны и с фундаментальной точки зрения, и как возможные светоизлучающие элементы либо ловушки для заряда в устройствах энергонезависимой (флэш) памяти. Вследствие квантоворазмерного эффекта свойства НК с размерами меньше 10 нм зависят от их размеров.

Проведены исследования светоизлучающих НК германия, сформированных в процессе печных отжигов пленок $\text{Ge}_{(x)}[\text{SiO}_2]_{(1-x)}$, полученных сораспылением в высоком вакууме мишеней германия и кварца на подложки при температуре 100 °С. По условиям роста молярная доля германия менялась от 10 до 40 %. С применением электронной микроскопии и спектроскопии комбинационного рассеяния света в исходных пленках с содержанием германия выше 20 молярных процентов обнаружены нанокластеры аморфного Ge с размерами ~ 4–5 нм. Для кристаллизации аморфных нанокластеров применялись печные отжиги при температурах до 650 °С. Исследована кинетика кристаллизации нанокластеров германия. Получено, что в системе остается приблизительно до одной трети аморфной фазы, предположительно на границе нанокристалл / окружающая аморфная матрица SiO₂. Обнаружено, что при отжигах в обычной атмосфере происходило частичное либо полное (при молярной доле германия 30 % и менее) окисление нанокластеров германия. Обнаружена интенсивная фотолюминесценция в ИК-диапазоне от квантово-размерных НК германия.

Таким образом, продемонстрированы светоизлучающие свойства НК Ge. Для увеличения квантового выхода фотолюминесценции и повышения температуры ее гашения необходимо подавление каналов безызлучательной рекомбинации.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук, доцент В. А. Володин

Тепловизионный анализ сорбционной активности поверхности катализаторов разной структуры и химического состава

А. В. Шепелин

Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН,
г. Новосибирск, Новосибирский государственный университет

Катализаторы на основе цеолитов широко используют в производстве. Механизмы межмолекулярного взаимодействия газовой и твердой фаз представляют при этом значительный научный интерес. Процесс гетерогенного катализа обычно подразделяют на пять стадий: диффузия газа к поверхности, адсорбция, химическая реакция, десорбция, диффузия продуктов реакции с поверхности твердого тела. Активность катализатора существенно зависит от эффективной площади твердой поверхности, которая у цеолитов огромная, что, в частности, определяет сорбционную способность этих материалов. Особую значимость имеют катализаторы, способные работать при комнатных температурах. С их помощью стремятся решить проблему холодного старта двигателей автомобилей.

Известно, что в процессах адсорбции и ряде каталитических реакций выделяется теплота. Соответственно, температура образца способна служить одной из физических характеристик сорбционного и / или каталитического процесса, позволяющих лучше понять механизм реакции.

В настоящей работе для изучения таких реакций был применен высокочувствительный (10^{-2} °С) и быстродействующий (100 кадров/с) матричный тепловизор ТКВр-ИФП/СВИТ. При $T = 24 \pm 2$ °С экспериментально исследовалась быстрая температурная динамика при подаче различных газов (воздух, O_2 , СО и др.) и их смесей в специальную реакционную камеру, прототип которой представлен в [1], где находились образцы, а также в режиме откачивания газа. Тестовыми образцами служили цеолиты разной структуры и химического состава.

Проведена количественная обработка тепловизионных данных, полученных из измеренных термофильмов, и выявлены характеристики сорбционно-каталитической активности поверхности образцов.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 18-08-00956).

1. *Vainer B. G. et al.* Synchronous use of FPA-based infrared thermography and fast ellipsometry for high-sensitive investigation of the adsorption-desorption processes rapidly progressing on solid surfaces// QIRT-2014-167. URL: <http://qirt.gel.ulaval.ca/archives/qirt2014/QIRT2014.html>.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Б. Г. Вайнер

Исследование механизмов рекомбинации в гетероэпитаксиальных структурах $Cd_xHg_{1-x}Te/Si(013)$, выращенных методом МЛЭ

Д. А. Шефер

Новосибирский государственный университет

Актуальными проблемами современной инфракрасной техники являются увеличение рабочей температуры фотодиодов относительно жидкого азота и борьба с механическими напряжениями в широкоформатных матрицах при циклировании температур.

Переход от традиционных p - r структур к структурам p - n , легированных As и In, теоретически позволяет снизить величину темнового тока на 2–3 порядка. Поскольку величина темнового тока определяется временем жизни и подвижностью неосновных носителей заряда, необходимо изучение механизмов рекомбинации в нелегированных и легированных As- и In-структурах. Работа с широкоформатными матрицами сопряжена с дополнительными трудностями, обусловленными несоответствием КТР подложки $CdHgTe$ (преимущественно из GaAs, CdTe, CdZnTe) и Si микросхемой обработки сигнала. Переход на Si подложки решает эту проблему, но из-за сильного рассогласования параметров кристаллических решеток $CdHgTe$ и Si может оказывать негативное влияние на параметры фотодиодов.

Для выявления механизмов рекомбинации исследовались температурные зависимости времени жизни в образцах после роста и после отжига. Нелегированные и легированные In на всю толщину гетероструктуры $Cd_xHg_{1-x}Te$ с $x = 0,3$ и толщиной 5–7 мкм были выращены методом МЛЭ на Si подложке 013. Концентрация в нелегированных структурах $\sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$, в легированных In — $1 \div 5 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$. Часть образцов подвергались температурным отжигам в парах ртути или инертной атмосфере для введения и удаления вакансий ртути в металлической подрешетке. На всех образцах снимались температурные зависимости времени жизни, магнетопольевые зависимости коэффициента холла и проводимости, а также регистрировалась плотность поверхностных дефектов, выявляемых селективным травлением.

Температурные зависимости времени жизни описывались расчетными моделями с привлечением Оже-рекомбинации, излучательной рекомбинации и рекомбинации Шокли — Рида. Было обнаружено, что основной вклад в рекомбинацию в гетероструктурах $CdHgTe/Si$ дают вакансии, дефекты упаковки и дислокации, присущие данному материалу, не влияют на время жизни. Оценены параметры рекомбинационных центров.

Научный руководитель — д-р физ.-мат. наук М. В. Якушев

Указатель авторов

Амельчукова В. Ю.	5, 24, 29	Машарин М. А.	19
Аникеева В. Е.	6	Милёхин И. А.	20
Боякинов Е. Ф.	10, 26	Назаров Н. А.	21
Бурдастых М. В.	7	Насибулов И. А.	22
Васильев Н. Н.	8	Никифоров В. Е.	23
Дирко В. В.	9	Олицкий В. К.	12
Захаркина Е. И.	10, 26	Попова Д. С.	5, 24, 29
Захаров Р. Н.	11	Самусов И. А.	25
Заяханов В. А.	9	Семенова А. А.	10, 26
Каранский В. В.	12	Суханов М. А.	27
Карева К. В.	9	Федин И. В.	28
Кашеев А. С.	13	Федорова Д. В.	5, 24, 29
Колосовский Д. А.	14	Хорошилов В. С.	30
Кудлаев Я. В.	15	Чжан Жуй.	31
Кустов Д. А.	16	Шарин Е. П.	11
Литвинцев А. С.	17	Шепелин А. В.	32
Маншуров Ш. Т.	18	Шефер Д. А.	32

Оглавление

Амельчукова В. Ю., Попова Д. С., Федорова Д. В.	5
Аникеева В. Е.	6
Бурдастых М. В.	7
Васильев Н. Н.	8
Дирко В. В., Заяханов В. А., Карева К. В.	9
Захаркина Е. И., Семенова А. А., Боякинов Е. Ф.	10
Захаров Р. Н., Шарин Е. П.	11
Каранский В. В., Олицкий В. К.	12
Кашеев А. С.	13
Колосовский Д. А.	14
Кудлаев Я. В.	15
Кустов Д. А.	16
Литвинцев А. С.	17
Маншуров Ш. Т.	18
Машарин М. А.	19
Милёхин И. А.	20
Назаров Н. А.	21
Насибулов И. А.	22
Никифоров В. Е.	23
Попова Д. С., Федорова Д. В., Амельчукова В. Ю.	24
Самусов И. А.	25
Семенова А. А., Захаркина Е. И., Боякинов Е. Ф.	26
Суханов М. А.	27
Федин И. В.	28
Федорова Д. В., Амельчукова В. Ю., Попова Д. С.	29
Хорошилов В. С.	30
Чжан Жуй.	31
Шепелин А. В.	32
Шефер Д. А.	32

Научное издание

МНСК-2018

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

Материалы

56-й Международной научной студенческой конференции

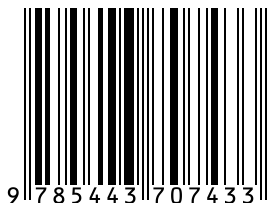
22–27 апреля 2018 г.

Корректор *Д. М. Валова*
Верстка *А. С. Терешкиной*
Обложка *Е. В. Неклюдовой*

Подписано в печать 20.04.2018 г.
Формат 60 × 84/16. Уч.-изд. л. 2,25. Усл. печ. л. 2.
Тираж 100 экз. Заказ № 65.
Издательско-полиграфический центр НГУ.
630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2.

Секция
КВАНТОВАЯ
ФИЗИКА

ISBN 978-5-4437-0743-3



N* Новосибирский
государственный
университет
***НАСТОЯЩАЯ НАУКА**

