

**НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

**МАТЕРИАЛЫ  
55-й МЕЖДУНАРОДНОЙ  
НАУЧНОЙ СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ**

**МНСК–2017**

**17–20 апреля 2017 г.**

**КВАНТОВАЯ ФИЗИКА**

**Новосибирск  
2017**

УДК 53  
ББК 22.31я431

Материалы 55-й Международной научной студенческой конференции МНСК-2017: Квантовая физика / Новосиб. гос. ун-т. – Новосибирск:ИПЦ НГУ, 2017. – 40 с.

ISBN 978-5-4437-0620-7

**Научный руководитель секции** – академик РАН, д-р физ.-мат. наук, проф., директор Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН Латышев А. В.

**Председатель секции** – чл.-корр. РАН, д-р физ.-мат. наук, директор Института лазерной физики СО РАН Тайченачев А. В.

**Ответственный секретарь секции** – канд. физ.-мат. наук, научный сотрудник Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН Блошкин А. А.

**Экспертный совет секции**

д-р физ.-мат. наук Альперович В. Л.  
д-р физ.-мат. наук Квон Зе Дон  
канд. физ.-мат. наук Блошкин А. А.  
канд. физ.-мат. наук Исламов Д. Р.  
канд. физ.-мат. наук Родякина Е. Е.

ISBN 978-5-4437-0620-7

© Новосибирский государственный университет, 2017

**NOVOSIBIRSK STATE UNIVERSITY  
SIBERIAN BRANCH OF THE RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES**

**PROCEEDINGS  
OF THE 55th INTERNATIONAL STUDENTS  
SCIENTIFIC CONFERENCE**

**ISSC-2017**

**April, 17–20, 2017**

**QUANTUM PHYSICS**

**Novosibirsk, Russian Federation  
2017**

Proceedings of the 55<sup>th</sup> International Students Scientific Conference.  
Quantum physics / Novosibirsk State University. Novosibirsk, Russian  
Federation. 2017. 40 pp.

ISBN 978-5-4437-0620-7

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

**Section head** – Dr. Phys.-Math. Taichenachev A. V.

**Responsible secretary** – Cand. Phys.-Math. Bloshkin A. A.

**Section scientific committee**

Ph. D. Semiconductor Physics Al'perovich V. L.

Ph. D. Semiconductor Physics Kvon Ze Don

Ph. D. Semiconductor Physics Bloshkin A. A.

Ph. D. Semiconductor Physics Islamov D. R.

Ph. D. Semiconductor Physics Rodyakina E. E.

## Влияние спиновых флуктуаций на фазовые переходы в модельном мультиферроике

Аллахвердян В. А., Дергачёв М. А.

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

В данной работе исследуется фазовый переход типа «схлопывание» в модельном мультиферроике с двумя магнитными подсистемами при наличии сильного магнитного поля, сравнимого с полем обменного взаимодействия, и слабой связью между сегнетоэлектрической и упругой подсистемами.

При изучении структурных фазовых переходов флуктуации параметра порядка достаточно сильны и требуют корректного описания. Последовательный учёт флуктуаций методом ренормализационной группы и  $\mathcal{E}$ -разложения приводит к тому, что фазовый переход в данном модельном сегнетоэлектрике оказывается фазовым переходом первого рода, близким ко второму, при отличной от нуля релятивистской константе магнитоэлектрической связи и произвольной диэлектрической проницаемости [1].

Рассмотрены связанные магнитная, сегнетоэлектрическая и упругая подсистемы и показано, что в “срыве” фазового перехода превращения фазового перехода второго рода в фазовый переход первого рода, близкий ко второму, релятивистская магнитоэлектрическая связь играет большую роль, чем обменная магнитоупругая энергия.

Гамильтониан модели выбран в следующем виде  $H = H_M + H_F + H_U + H_{MF} + H_{MU}$  [1, 2], где

$$\left\{ \begin{array}{l} H_U = \frac{1}{2} \int d\vec{x} c_{ij} u_{ij}^2, \\ H_F = \int d\vec{x} \left[ -\frac{1}{2} x p^2 + \frac{1}{4} x p^4 + \frac{1}{2} s \left( \frac{\partial p}{\partial x_i} \right)^2 \right], \\ H_M = \int d\vec{x} \left\{ \delta (\bar{M}^1 \bar{M}^2) + \alpha \frac{\partial \bar{M}^1}{\partial x_i} \frac{\partial \bar{M}^2}{\partial x_i} + \frac{\alpha'}{2} \left[ \left( \frac{\partial \bar{M}^1}{\partial x_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial \bar{M}^2}{\partial x_i} \right)^2 \right] \right\}, \\ H_{MF} = \int d\vec{x} \gamma_i p^2 (\bar{M}^1 \bar{M}^2), \\ H_{MU} = \int d\vec{x} \gamma_{2ij} u_{ij} (\bar{M}^1 \bar{M}^2) \end{array} \right.$$

После обезразмеривания, перехода к импульсному представлению и ренормгруппового преобразования система уравнений принимает следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial \tau}{\partial x} = \left[ 2 - \left( \frac{n+2}{n+8} \right) k_n \Gamma_1 \right] \tau \\ \frac{\partial \omega}{\partial x} = -\frac{1}{2} \frac{n}{n+8} k_n \Gamma_2^2 \\ \frac{\partial c}{\partial x} = -\frac{3}{2} \frac{n}{n+8} k_n \Gamma_3^2 \\ \frac{\partial \Gamma_1}{\partial x} = \varepsilon \Gamma_1 - k_n \Gamma_1^2 \\ \frac{\partial \Gamma_2}{\partial x} = \left[ \frac{\varepsilon}{2} - \left( \frac{n+2}{n+8} \right) k_n \Gamma_1 \right] \Gamma_2 \\ \frac{\partial \Gamma_3}{\partial x} = \left[ \frac{\varepsilon}{2} - \left( \frac{n+2}{n+8} \right) k_n \Gamma_1 \right] \Gamma_3 \end{cases}$$

Для данной системы получены фазовые портреты и исследованы особые точки на устойчивость, что и позволяет делать вышеуказанные выводы о характере фазового перехода.

---

1. Карчев О. Г., Савченко А. М. Расчет характеристик фазовых переходов магнитоупорядоченной системы методом ренормализационной группы // *Вестник Московского университета. Серия 3: Физика, астрономия*. 2010. № 6. С. 110–113.

2. Кызыргулов И.Р., Шарафуллин И.Ф. Влияние внешнего электрического и магнитного полей на магнитоэлектрическое взаимодействие в сегнетомагнетиках // *Известия ВУЗов. Физика* - 2009г. Т. 52. № 2. С. 43–47.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Савченко А. М.

**Фазовый состав композиционного материала в зоне контакта  
алюминий-титан**

Анфилофьев В. В., Шелепова С. Ю.  
Восточно-Казахстанский государственный университет  
им. С. Аманжолова, г. Усть-Каменогорск

Работа посвящена исследованию структуры и фазового состава композиционного материала титан-алюминий, полученного сваркой взрывом. Пластинки титана и алюминия толщиной 0,5–1 мм были соединены сваркой взрывом по методике [1] в институте Гидродинамики им. М. А. Лаврентьева В. И. Мали. Данный материал был исследован ранее в работе [2], однако наши результаты отличаются.

По итогам рентгеноструктурного анализа, выполненного на рентгеновском дифрактометре фирмы «Bruker», были обнаружены тетрагональная и гексагональная фазы  $Al_2Ti$ . Определены параметры решеток для тетрагональной и гексагональной фаз  $Al_2Ti$ . Нами исследованы условия перехода от одного типа кристаллической решетки к другому. Нами обнаружено формирование текстуры под влиянием анизотропии силовых нагрузок при получения композиционного материала титан-алюминий.

---

1. Павлюкова Д. В. Структура и механические свойства слоистых материалов на основе титана и алюминия, полученных по технологии сварки взрывом и дополнительной термической обработки: Автореферат диссертации на соискание ученой степени к.т.н.- Новосибирск: НГТУ, 2011. 19 с.

2. Гуревич Л. М. Структура и свойства слоистых титано-алюминиевых композитов, упрочненных частицами интерметаллидов/ Л. М. Гуревич, Ю. П. Трыков, В. Н. Арисова, и др. // Известия ВолгГТУ № 11(59) / Волгоград, 2009. С. 5–11.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук, проф. Квеглис Л. И.

**Деформации и поверхностная атомная диффузия на  
структурированных подложках кремния, полученных  
с использованием ионного облучения**

Атовуллаев Т.

Новосибирский государственный университет

В мире наблюдается интерес к созданию пространственно-упорядоченных массивов наностроек. Эти структуры представляются перспективными для прикладных разработок, в частности, МОП-структур с повышенной подвижностью носителей в канале. Для создания таких структур можно использовать гетероэпитаксию на структурированной подложке. Структурированной мы называем подложку, на поверхности которой с помощью литографии создается регулярный рисунок с канавками или ямками. В ходе гетероэпитаксии наностройки могут зарождаться в углублениях с формированием пространственно упорядоченного массива. Места зарождения наностроек зависят от напряженного состояния поверхности. Поэтому важно обладать знанием о деформациях на поверхности подложек.

В ИФП СО РАН разработана технология создания регулярного массива наностроек, использующая комбинацию наноимпринт-литографии и ионного облучения подложки [1]. Внедренные ионы могут создавать дополнительные деформации на поверхности подложки. В данной работе моделировалось влияние угла наклона стенок канавок структурированных подложек и концентрации междоузлий германия в кластере под канавкой на поверхностные деформации подложки. Методом молекулярной динамики были рассчитаны поверхностные деформации канавок, возникшие в результате ионного внедрения. Расчеты показали, что внедрение кластера междоузлий может приводить как к растяжению, так и к сжатию в канавках. Рассчитан потенциальный рельеф в канавке. На его основе изучены свойства поверхностной атомной диффузии.

---

[1]. Zh. V. Smagina, N. P. Stepina, V. A. Zinovyev, P. L. Novikov, P. A. Kuchinskaya, and A. V. Dvurechenskii, Applied Physics Letters 105, 153106 (2014).

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



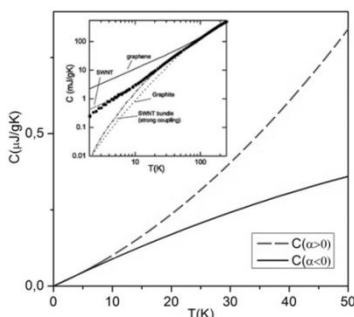
## Теплоёмкость неидеального графена

Белослудцева А. А., Баркалов Л. Д.

Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники

Современные технические возможности пока не позволяют экспериментально исследовать теплоемкость графена. Авторы единичных теоретических работ по теплоемкости преимущественно идеального графена сходятся во мнении, что именно примеси, кулоновское взаимодействие, площадь графенового листа и, возможно, фоннное взаимодействие определяют низкотемпературное поведение теплоемкости.

В настоящем исследовании проведено теоретическое исследование электронной теплоёмкости металлизированного эпитаксиального графена с примесями и структурными областями типа ближнего порядка. Было получено выражение для низкотемпературной электронной теплоемкости графена, зависящее от температуры, параметра ближнего порядка, размеров элементарной ячейки графена, концентрации инородных атомов.



Температурные зависимости электронной теплоемкости для случаев упорядочения и расслоения. На вставке данные из [1].

На рисунке приведены температурные зависимости электронной теплоемкости для случаев упорядочения и расслоения. Полученные зависимости подобны и близки по величине с рассчитанной фоннной теплоемкостью и экспериментальными данными для одностенных углеродных нанотрубок (вставка из рисунка). Т. е. электронная теплоемкость неидеального графена может быть определяющей в области температур до  $\sim 100$ К. Тем более что вопрос о существовании фононов в сильно неоднородных структурах требует отдельного обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках проекта 17-02-00108 А.

1. Hone, J., Batlogg, B., Benes, Z., Johnson, A. T., Fischer, J. E. Quantized phonon spectrum of singlewall carbon nanotubes: Science 2000, 289, pp. 1730–1733.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Бобенко Н. Г.,  
канд. физ.-мат. наук Пономарёв А. Н.

**Исследование V-дефектов твердого раствора CdHgTe**

Брудный П. А.

Томский государственный университет

Методом зонда Кельвина исследовано распределение контактной разности потенциалов между острием иглы кантилевера и поверхностью МДП структуры на основе твердого раствора CdHgTe р и n типов проводимости подвергнутой воздействию импульсного разряда. Исследуемые образцы представляли собой МДП фотоприемник, имеющий следующую структуру: омический контакт In/подложка (310) GaAs/буферные слои на основе ZnTe и CdTe/рабочие слои CdHgTe/диэлектрический слой на основе Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/контактные площадки из In.

Находилась среднее значение контактной разности потенциалов (КРП) всей эпитаксиальной пленки и значение КРП отдельно взятого кристаллита, образующего V-дефект. Далее, определялась разница между данными значениями ( $\Delta\phi$ ) и строилось статистическое распределение. Показано что распределение  $\Delta\phi$  для МДП структуры р типа проводимости до и после облучения может быть описано семейством гауссовых распределений. До облучения гауссово распределение имеет 4 пика соответствующие четырем типам кристаллитов. После импульсного облучения диапазон разброса  $\Delta\phi$  увеличился по сравнению с исходным распределением, а функция распределения стала более сложной и может быть описана семейством гауссовых кривых, содержащим 8 пиков. Таким образом, облучение объемным наносекундным разрядом МДП структур на основе р-CdHgTe приводит к увеличению диапазона отклонения величины КРП отдельных кристаллитов по отношению к КРП эпитаксиальной пленки CdHgTe, образованию потенциального гало по периферии V-дефекта, более плавному распределению КРП в области V-дефекта без проявления потенциального барьера по периферии отдельных кристаллитов. В то же время воздействие импульсного разряда на структуру n-CdHgTe не приводило к существенному изменению поверхностного распределения КРП.

Наблюдаемые изменения  $\Delta\phi$  при импульсном разряде могут быть обусловлены изменением фазового состава V-дефектов.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Новиков В. А.

## Исследование перехода сверхпроводник-изолятор в тонких плёнках NbTiN

Бурдастых М. В.

Новосибирский государственный университет

Исследование процессов, происходящих при разрушении сверхпроводящего состояния двумерной системы, играет значительную роль в современной физике конденсированного состояния, так как при определённых условиях подавление сверхпроводимости может приводить к прямому переходу системы в изолирующую фазу.

Целью работы является экспериментальное исследование перехода сверхпроводник-изолятор в квазидвумерных неупорядоченных плёнках  $\text{Nb}_{0,67}\text{Ti}_{0,33}\text{N}$  толщиной менее 18 нм. В качестве управляющих параметров перехода использовались сопротивление плёнок при азотной температуре (степень беспорядка) и внешнее магнитное поле. Исследование заключалось в анализе температурных и магнитопольевых зависимостей сопротивления, а также вольт-амперных характеристик.

В работе продемонстрирован резкий переход исследуемой системы из сверхпроводящего состояния в изолирующее при увеличении степени беспорядка. Для сверхпроводящих плёнок рост беспорядка приводит к уменьшению критической температуры перехода до 0.72 К. Показано, что сопротивление диэлектрических плёнок при  $T < 10$  К описывается активационным законом.

Приложение к плёнкам внешнего магнитного поля приводит к магнитоиндуцированному переходу сверхпроводник-изолятор (B-SIT). При этом на магнитопольевых зависимостях сопротивления обнаружены характерные для B-SIT особенности: наличие точки пересечения изотерм ( $B_c, R_c$ ), гигантское отрицательное магнетосопротивление в сильных магнитных полях  $B > 8.4$  Тл, а также экспоненциальный рост сопротивления плёнок на диэлектрической стороне B-SIT. Вместе с тем при низких температурах продемонстрировано отклонение зависимостей  $R(1/T)$  от активационного закона в слабых магнитных полях  $B < 2.5$  Тл и переход к гиперактивационному поведению.

Проведён анализ вольт-амперных характеристик с точки зрения теории перехода Березинского-Костерлица-Таулеса и теории разогрева двумерного электронного газа. Показано, что в исследуемой системе происходит ВКТ-переход и  $T_{\text{ВКТ}}$  уменьшается с ростом сопротивления плёнок при азотной температуре.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Миронов А. Ю.

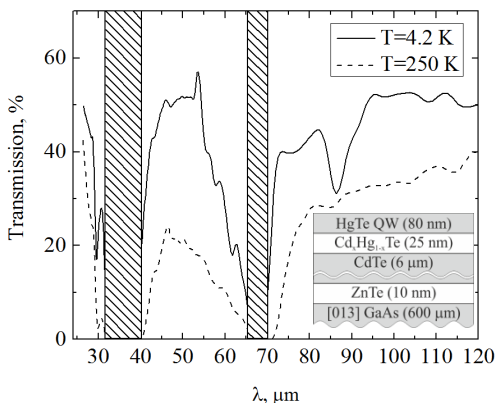
## Взаимодействие терагерцового излучения с трехмерным топологическим изолятором на основе HgTe квантовой ямы

Васильев Н. Н.

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

Топологические изоляторы представляют новый класс материалов, одной из отличительных особенностей которых является наличие поляризованных по спину поверхностных проводящих носителей.

В нашей группе, которая занимается исследованием квантовых ям HgTe как представителей трехмерных топологических изоляторов, была обнаружена особенность на температурной эволюции спектров пропускания при длине волны около 85 мкм (см. рисунок).



Спектр пропускания

Данный провал пропадает при постепенном повышении температуры от гелиевой до комнатной, в структурах с толщиной слоя HgTe 80 и 200 нм. На текущий момент в литературе отсутствует однозначная информация о природе обнаруженной особенности. Однако известно, что ширина запрещенной зоны 80 нм пленки HgTe, составляет 15 мэВ, что совпадает с положением особенности спектра. На спектре пропускания менее изученной квантовой ямы толщиной 200 нм наблюдается аналогичная особенность.

Данная работа посвящена определению причин возникновения обнаруженного провала в спектрах пропускания в квантовых ямах толщиной 80 и 200 нм на Фурье-спектрометре при температурах от 4.2 до 300К.

Научный руководитель – Савченко М. Л.

## Исследование электрофизических свойств гибридных материалов на основе MoS<sub>2</sub>-графен

Дзюбина Л. Л.

Новосибирский государственный университет  
Институт неорганической химии им. А. В. Николаева

Уникальные оптические, механические и электрофизические свойства графена способствуют повышению интереса к изучению и созданию материалов на его основе. Одним из актуальных направлений современной электроники является создание и исследование композитных структур на основе графена и других слоистых материалов. Данная работа посвящена исследованию композиционных материалов на основе MoS<sub>2</sub>-графен. Такие структуры характеризуются высокой подвижностью носителей заряда, а также обладают устойчивостью при интеркаляции ионов лития [1,2]. Задачей данной работы является изучение электрофизических свойств композитного материала на основе MoS<sub>2</sub>-графен в зависимости от состава.

Для создания материала использовался метод термобарического синтеза на основе наноалмазов и трисульфида молибдена (MoS<sub>3</sub>). Синтез проводился в вакууме при температуре 1400°C и давлении 500 атмосфер в течении 30 минут с разным соотношением компонент. Полученные образцы исследовались с помощью метода комбинационного рассеяния света (КРС), а также была получена зависимость проводимости от состава образца.

В спектрах КРС были обнаружены пики рассеяния на частотах, близких к колебаниям E<sub>1g</sub>, E<sub>2g</sub>, A<sub>1g</sub>, A<sub>2u</sub> MoS<sub>2</sub> (~287, 383, 408 и 470 см<sup>-1</sup> соответственно) [3]. Так же на спектрах присутствуют D, G, 2D моды многослойного графена (~ 1360, 1587 и 2710 см<sup>-1</sup> соответственно). Наличие интенсивного D пика может говорить о высокой дефектности углеродного материала [4].

Измерения проводимости производились для образцов с содержанием углерода от ста до одного процента, а также для образца дисульфида молибдена. Проводимость измерялась с помощью четырёхзондового метода и с помощью метода Ван-дер-Пау. Установлено, что содержание одного процента углерода достаточно для преодоления порога перколяции.

---

[1] Kwak J. Y., Hwang J., Calderon B., Alsalman H., Munoz N., Schutter B., and Spencer M.G. Electrical Characteristics of Multilayer MoS<sub>2</sub> FET's with MoS<sub>2</sub>/Graphene Heterojunction Contacts//Nano Lett. 2014, 14, 4511–4516

[2] Huang K.-J., Wang L., Liu Y.-J., Liu Y.-M., Wang H.-B., Gan T., Wang L.-L. Layered MoS<sub>2</sub>-graphene composites for supercapacitor applications with enhanced capacitive performance// international journal of hydrogen energy 38(2013)14027-14034

[3] Wieting T. J., Schluter M., Electrons and phonons in layered crystal structures// D. Reidel publishing company Dordrecht: holland.

[4] Calizo I., Teweldebrhan D., Bao W., Miao F., Lau C. N. and Balandin A. A. Spectroscopic Raman Nanometrology of Graphene and Graphene Multilayers on Arbitrary Substrates// Journal of Physics: Conference Series 109 (2008) 012008.

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

## Синтез квантовых точек Ge на Si(100) и Si(111) методом молекулярно-лучевой эпитаксии

Дирко В. В., Серохвостов В. Ю., Пицагин А. А.  
Томский государственный университет

В микроэлектронике большое внимание уделяется структурам на основе кремния, составляющим элементную базу большинства современных электронных устройств. На основе полупроводниковых гетероструктур создаются низкоразмерные системы, в которых, наряду с изменением физических свойств объектов, возникают новые физические эффекты, связанные с пространственным ограничением движения носителей заряда.

Пространственное ограничение носителей заряда по трем измерениям приводит к появлению нульмерного объекта – квантовой точки, в которой энергетический спектр представляет собой дискретные уровни. Квантовые точки могут играть роль одноэлектронных транзисторов, однофотонных приемников и генераторов, высокоэффективных фотопреобразователей. Гетероструктуры Ge/Si с квантовыми точками Ge являются одними из наиболее перспективных для использования в оптоэлектронике.

Основным способом создания гетероструктур с квантовыми точками Ge на Si является метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Технология МЛЭ в условиях сверхвысокого вакуума позволяет выращивать бездефектные сверхтонкие с резкими изменениями состава на границах раздела, эпитаксиальные слои высокой чистоты и структуры со сложным составом и со сложным профилем легирования.

Одним из основных методов *in situ* контроля процесса роста эпитаксиальных структур является метод дифракции быстрых электронов (ДБЭ). Метод ДБЭ дает информацию об атомной структуре поверхности и может использоваться в процессе роста, отражая при этом реальную картину ростового процесса, что позволяет управлять технологическим процессом синтеза квантовых точек.

Были проведены эксперименты по синтезу квантовых точек Ge на Si. В процессе синтеза структур методом ДБЭ получены картины дифракции при различных стадиях роста Ge на Si(111) и Si(100). При использовании подложки Si(111) получена сверхструктура  $7 \times 7$ , Si(100) - сверхструктура  $2 \times 1$ . Кроме того, получены картины дифракции при переходе от 2D к 3D росту и при формировании квантовых точек Ge с огранкой {105}.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Коханенко А. П.

## Синтез и изучение оптических свойств органоминерального перовскита $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$

Забелич Б. Ю.

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

В последнее время ведётся активный поиск новых материалов для тонкоплёночных солнечных элементов (СЭ). Среди них особое внимание привлекает органоминеральный перовскит  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ . Оптимальная ширина запрещенной зоны (~1,5 эВ), большая длина пробега носителей заряда (1 мкм в пленках, 175 мкм в монокристаллах) и малая энергия связи экситонов (16 мэВ) позволили получить высокую эффективность лабораторных СЭ [1]. Синтез материала не требует дорогостоящих высоковакуумных установок и редких химических элементов, что делает материал перспективным для солнечной энергетики.

Цель данной работы – синтез и изучение оптических и электрофизических свойств пленок и кристаллов органоминерального перовскита.

Кристаллы перовскита были синтезированы с использованием затравок из пересыщенного раствора с контролируемым понижением температуры. Методом EDS был подтвержден стехиометрический состав кристаллов. Измерение спектров фотолуминесценции при понижении температуры от 300К до 88К показало резкий сдвиг максимума излучения при ~ 170 К (от 780 нм до 740 нм). Это явление объясняется наличием у перовскита структурных модификаций. При ~170 К перовскит претерпевает фазовый переход из тетрагональной в орторомбическую фазу, изменяется ширина запрещенной зоны и, следовательно, сдвигается максимум излучения.

---

1. H. J. Snaith. Perovskites: The Emergence of a New Era for Low-Cost, High-Efficiency Solar Cells. *J. Phys. Chem. Lett.*, 2013, 4, 3623–3630.

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук Терещенко О. Е.;  
канд. хим. наук Семенова О. И.



## Моделирование кинетики переходной электролюминесценции органических полупроводников на основе Alq<sub>3</sub>

Зятиков И. А., Шульга А. Ю.

Томский государственный университет

Органические полупроводники широко вовлекаются в различные области оптоэлектроники благодаря низкой стоимости, простым и многообразным технологиям обработки, механической гибкости по сравнению с неорганическими материалами, а также возможностью получать излучение с заданной длиной волны или широким спектром излучения [1]. Эффективность применения органических полупроводников зависит от параметров материала (подвижность и концентрация носителей заряда (НЗ), время жизни НЗ).

Одним из способов определения подвижности НЗ является метод переходной электролюминесценции (ПЭЛ). Моделирование кинетики ПЭЛ, основанной на теории Фаулера-Нордхейма [2], позволяет оценить характерные времена НЗ и значения подвижности НЗ. Расчет параметров кинетики ПЭЛ проводится с учетом варьирования толщин органических слоёв, высот энергетических барьеров и амплитуды подаваемого прямоугольного импульса напряжения на контакты структуры.

Используя данную теорию, были построены графики зависимости интенсивности ПЭЛ от времени, рассчитаны времена роста интенсивности электролюминесценции в органических полупроводниках с разной толщиной органических слоёв. В качестве эмиссионного слоя использовался полимер трис(8-гидроксихинолинат) алюминия (Alq<sub>3</sub>). Получено качественное совпадение теоретических результатов с экспериментальными данными.

---

1. Зятиков И. А., Войцеховский А. В., Коханенко А. П., Копылова Т. Н., Тельминов Е. Н., Дегтяренко К. М., Медведев М. Д. Переходная электролюминесценция структур ОСИД с эмиссионным слоем на основе Alq<sub>3</sub> // Известия вузов. Физика. 2015. Т. 58. № 8/2. С. 252–255.

2. Nikitenko, V. R., Tak, Y. H., & Bassler, H. Rise time of electroluminescence from bilayer light emitting diodes // Journal of Applied Physics. 1998. V. 84. № 4. pp. 2334–2340.

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

**Температурная зависимость характеристик сенсоров  $H_2$  на основе тонких пленок Pt/Pd/Au/SnO<sub>2</sub>:Sb,Ag,Y**

Ким С. В.

Томский государственный университет

В качестве объекта исследований были выбраны сенсоры на основе тонких пленок Pt/Pd/Au/SnO<sub>2</sub>:Sb,Ag,Y.

Сопротивление исследуемых пленок в атмосфере чистого воздуха  $R_0$  при температуре 300 K составляет 2,9 МОм, что примерно равно  $R_0$  при 300 K для пленок Pt/Pd/SnO<sub>2</sub>:Sb. При повышении температуры  $T$  от 300 до 500 K  $R_0$  падает за счет ионизации мелких и глубоких донорных уровней в объеме пленки. В области температур 300–70 K  $\Delta E_{a1}=0,47$  эВ, а в области 370–470 K  $\Delta E_{a2}=0,63$  эВ. Величина энергии активации зависит от типа добавок в объеме и на поверхности пленок SnO<sub>2</sub>.

При дальнейшем повышении  $T$  до 673 K наблюдается рост сопротивления пленок за счет увеличения хемосорбированного кислорода в форме O на поверхности SnO<sub>2</sub>.

Откликом сенсоров принято считать отношение  $G_H/G_0$ , где  $G_H$  – проводимость сенсора при воздействии  $H_2$ ;  $G_0$  – проводимость в атмосфере чистого воздуха. Температура  $T_{MAX}$  при которой имеет место максимальное значение  $G_H/G_0$  составляет 723 K. Однако, в качестве рабочей температуры сенсоров при детектировании  $H_2$  необходимо выбрать  $T < T_{MAX}$ , так как технологический отжиг сенсоров проводился при температуре  $T_{отж} = 723$  K, при  $T > T_{отж}$  происходит изменение микроструктуры пленок SnO<sub>2</sub>, что ведет к нестабильности параметров приборов. Отклик сенсоров при  $T = T_{MAX}$  составляет 12.

Из описанного выше можно сделать следующие выводы: 1) несмотря на большие значения  $\Delta E_{a1}$  и  $\Delta E_{a2}$  и наличие добавок металлов, сенсоры на основе пленок Pt/Pd/Au/SnO<sub>2</sub>:Sb,Ag,Y обладают относительно низким сопротивлением; 2) рекомендуемый диапазон рабочих температур сенсоров водорода на основе пленок Pt/Pd/Au/SnO<sub>2</sub>:Sb,Ag,Y составляет 623 – 713 K. 3) наличие тройного катализатора на поверхности пленок и введение в объем SnO<sub>2</sub> добавок Ag и Y способствуют высоким значениям  $G_H/G_0$ .

Научный руководитель – мл. науч. сотр. Алмаев А. В.

## Термохимическое моделирование реакции разложения в фульминате серебра

Ковалев Е. В.

Кемеровский государственный университет

Разложение фульмината серебра исследовалось различными авторами. Экспериментально установлено, что разложение фульминатов сопровождается выделением газообразного CO и N<sub>2</sub> и образованием металлического серебра [1], в соответствии с чем записывается следующая реакция разложения:  $2AgCNO \rightarrow 2Ag + (CNO)_2 \rightarrow 2Ag + 2CO + N_2$ . При этом механизмы протекания реакции остаются до конца неисследованными, в том числе не оговаривается возможность образования промежуточных комплексов.

В настоящей работе изучались молекулярные комплексы и кластеры на основе кристаллического  $AgCNO$  с целью моделирования процесса разложения фульмината. Получены равновесные расстояния, полные энергии для комплексов  $Ag_n(CNO)_m$  при  $n = 2, 6, 7, 21$ ,  $m = 2, 6, 20$ . Все расчеты проводились в рамках теории функционала электронной плотности в приближении гибридного обменно-корреляционного функционала B3LYP с использованием базисов TZV квантово-химической программой Firefly [2].

Подробно был рассмотрен небольшой кластер  $Ag < \begin{matrix} CNO \\ OCN \end{matrix} > Ag$ , являющийся структурной составляющей кристаллического  $AgCNO$ , на предмет термохимического анализа. Реакция разложения моделировалась при температуре разложения фульмината серебра (443 К). Из анализа изменения энергии Гиббса, энтальпии и энтропии получено, что процесс разложения протекает самопроизвольно, что подтверждается экспериментальными данными. При этом найдено, что экзотермическими являются реакции  $Ag_2(CNO)_2 \rightarrow 2Ag + 2CNO$  (образуется два одиночных  $CNO$ ) и  $(CNO)_2 \rightarrow 2CO + N_2$  (разложение комплекса  $\begin{matrix} C - N - O \\ O - N - C \end{matrix}$ ). Эндотермическими являются реакции  $Ag_2(CNO)_2 \rightarrow 2Ag + (CNO)_2$  и  $2CNO \rightarrow 2CO + N_2$  (протекают за счет энтропийного фактора).

- 
1. Boddington T., Iqba Z. Decomposition of Inorganic Fulminates // Trans. Faraday Soc. 1969. №65. P. 509–518
  2. Granovsky A. A. Firefly version 8. [Электронный ресурс] URL: <http://classic.chem.msu.su/gran/firefly/index.html> (дата обращения: 10.02.2017).

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук, доцент Кравченко Н. Г.

**Анализ излучательных свойств нитридных квантовых точек для источников одиночных фотонов**

Мальшева Е. Д.

Новосибирский государственный университет

Рост популярности и сферы применения квантовой информатики и квантовой криптографии требует создания надёжных источников одиночных фотонов, сохраняющих стабильность при комнатной температуре. Перспективным объектом для создания таких структур являются квантовые точки. На сегодняшний день с целью создания термически стабильного источника одиночных фотонов активно ведутся исследования квантовых точек GaN/AlN и GaInN/GaN, однако квантовые точки GaInN/AlN и GaInN/AlGaN относительно слабо изучены.

Расчёт значений энергии основного перехода для квантовых точек (Ga,In)N/(Al,Ga)N производился в приближении эффективной массы. В результате были получены зависимости энергии основного перехода от высоты квантовой точки и процентного содержания In в ней. Экспериментально были исследованы структуры с квантовыми точками и структуры с объёмным материалом InGaN, выращенные на сапфировых подложках методом молекулярно-лучевой эпитаксии с использованием аммиачного источника азота, и определены оптимальные условия роста этих структур. Также была экспериментально исследована термическая стабильность эмиссии одиночных квантовых точек GaN/AlN.

В ходе данной работы было показано, что квантовые точки (Ga,In)N/(Al,Ga)N являются перспективной структурой для создания источников одиночных фотонов. Использование различного состава квантовых точек позволяет варьировать энергию излучаемых фотонов в широком диапазоне.

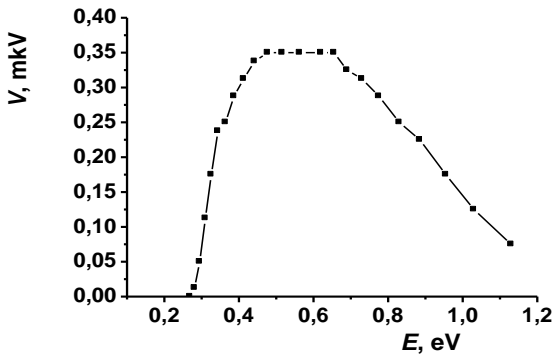
Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Александров И. А.

## Спектральная фоточувствительность поликристаллического кремния полученного пятикратной переплавкой металлургического кремния на солнечной печи

Маншуров Ш. Т.

Навоийский государственный горный институт, г. Алмалык, Узбекистан

Исследована спектральная фоточувствительность этой  $R_{Ohm-nSi}-R_{Ohm}$  структуры. Результаты измерения её вольтовой фоточувствительности, проведённые на спектрометре ИК-21 при комнатной температуре.



## Разрывы валентной зоны в напряженных слоях SiGeSn/Si с различным содержанием олова

Мурашов В. В., Туктамышев А. Р.

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

На данный момент имеется множество работ экспериментального характера, посвященных формированию тройных соединений SiGeSn, измерению оптических свойств этих полупроводников. Однако в большинстве таких работ не затрагивается проблема установления разрыва зон на гетероинтерфейсе Si/SiGeSn. Между тем, величина разрыва зон на границе Si/SiGeSn имеет важное значение для формирования приборных структур.

В данной работе рассматривается проблема установления разрыва зон на гетероинтерфейсе Si/SiGeSn с помощью метода спектроскопии адмиттанса, суть которого состоит в измерении проводимости системы на переменном токе, возникающей при изменении концентрации дырок в слое SiGeSn вследствие эмиссии носителей заряда из пленки в матрицу Si и их обратного захвата. В работе были исследованы гетероструктуры с квантовыми ямами (КЯ)  $\text{Si}_{0.7-y}\text{Ge}_{0.3}\text{Sn}_y$ , сформированными в матрице Si в диапазоне составов олова  $y = 0.04 - 0.1$  и определены энергии локализации дырок и разрыв валентной зоны. В рамках 6-ти зонного *kp*-метода определены энергии размерного квантования дырок в структурах, содержащих псевдоморфный слой  $\text{Si}_{0.7-y}\text{Ge}_{0.3}\text{Sn}_y$  в матрице Si. Из комбинации результатов математического моделирования и экспериментальных данных определена величина разрыва валентной зоны на гетерогранице Si/Si<sub>0.7-y</sub>Ge<sub>0.3</sub>Sn<sub>y</sub>.

Эксперимент показал, что при увеличении содержания олова в слое твердого раствора величина разрыва валентной зоны  $\Delta E_V^{exp}$  растет и описывается зависимостью от состава линейной функцией:  $\Delta E_V^{exp} = (0.205 \pm 0.012) + (3.35 \pm 0.195)y$ . Опираясь на известные из литературы значения разрыва валентных зон для гетеросистемы Si/Ge и Ge/Sn, можно восстановить теоретическое значение разрыва валентных зон в гетеросистеме Si/Si<sub>0.7-y</sub>Ge<sub>0.3</sub>Sn<sub>y</sub>. Данный разрыв, рассчитанный из литературных данных, аппроксимируется выражением:

$$\Delta E_V^{calc} = (0.209 \pm 0.0025) + (4.45 \pm 0.0408)y.$$

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Блошкин А. А.

## **Формирование неравновесных точечных дефектов в объеме Si и их взаимодействие с поверхностью при адсорбции Au**

Назариков Г. И.

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

Процессы диффузии как собственных точечных, так и примесных дефектов в объеме полупроводника активно исследуются уже длительное время. Однако процессы их взаимодействия с поверхностью остаются слабоизученными. В данной работе проведены исследования процесса ухода атомов золота с поверхности кремния (111) в объеме полупроводника. Анализ трансформации поверхности проводился *in situ* методом сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии.

На атомно-чистую поверхность кремния с сформированной широкой террасой диаметром до 100 мкм проводилось осаждение золота с различной скоростью при температуре  $T=900^{\circ}\text{C}$ . В процессе высокотемпературного осаждения на сингулярной террасе наблюдалось формирование 2D островков. Показано, что данные островки являются кремниевыми и их скорость роста увеличивается с увеличением потока золота на поверхность. Согласно литературным данным, процесс диффузии золота в объеме кремния может быть описан с помощью так называемого “kick-out” механизма замещения и диссоциативного механизма Франка-Тербулла. При реализации механизма “kick-out”, происходит увеличение концентрации междоузельных атомов кремния. Возникающий градиент концентрации создает поток междоузельных атомов кремния из объема к поверхности. Таким образом, рост 2D островков может быть обусловлен стоком междоузельных атомов кремния из объема на поверхность.

В данной работе предложена модель описывающая увеличение концентрации адатомов при осаждении золота на поверхность. Проведена оценка потока атомов кремния на поверхность, образующихся согласно механизму “kick-out“, оценена энергия ухода атомов золота с поверхности кремния (111) в объеме как  $2,7 \pm 0,2$  эВ.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-22-00143).

Научные руководители – д-р физ.-мат. наук, акад. РАН Латышев А. В.,  
Ситников С. В.

## **Исследование структурно-морфологических особенностей нанокристаллов CdSe методом высокоразрешающей электронной микроскопии**

Недомолкина А. А.

Новосибирский государственный университет

Нанокристаллы селенида кадмия являются одним из перспективных материалов для создания светоизлучающих приборов оптоэлектроники. Их оптические свойства существенно изменяются при переходе из крупнокристаллического состояния в наноструктурированное. При этом частота люминесцентного излучения зависит не только от размера, но и от формы нанокристаллов. В настоящее время существуют методы получения нанокристаллов в форме квантовых точек, квантовых стержней, квантовых пластин. Для реализации всех преимуществ и возможностей тех или иных низкоразмерных систем необходимым условием является получение надежной информации об их атомном строении и морфологии. Наиболее подходящей для решения этой задачи является техника высокоразрешающей электронной микроскопии (ВРЭМ), которая позволяет получать информацию, как о структуре и морфологии объекта анализа, так и о его химическом составе.

Целью данной работы является определение влияния условий синтеза и условий нанесения нанокристаллов на углеродную подложку на структурно-морфологические особенности отдельных нанокристаллов и параметры двумерных массивов нанокристаллов. Нанокристаллы CdSe были получены методом коллоидного синтеза, и наносились на подложку с помощью метода Ленгмюра-Блоджетт, который активно используется в производстве современных электронных приборов и позволяет наносить моно- и мультислой без особых экономических затрат.

В ходе данной работы с помощью высокоразрешающей электронной микроскопии были установлены структурно-морфологические особенности нанокристаллов CdSe и нанопластин CdSe и CdSe/CdS, полученных по коллоидной технологии, а также их двумерных массивов на углеродных подложках. Исследования проводились на электронном микроскопе JEOL 4000EX. Для получения количественной информации использовалась цифровая обработка экспериментальных ВРЭМ изображений с помощью пакета программ Digital Micrograph (GATAN).

Исследования выполнены на оборудовании ЦКП «Наноструктуры» в рамках проекта РНФ № 14-22-00143.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Гутаковский А. К.



**Расчет силы связывания частиц с поверхностью кварцевого резонатора по вольт-частотной зависимости, методика обработки экспериментальных кривых**

Некрасов Д. В.

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

По местоположению и величине искажений на резонансной кривой кварцевого резонатора, зная силу связывания вещества с поверхностью, можно определить массу оторванного вещества. И наоборот, зная величину оторванной массы, можно определить силу связывания вещества с поверхностью. Таким образом, осуществляя отрыв массы от поверхности, можно исследовать такие объекты, как: вирусы, аэрозольные частицы, бактерии, макромолекулы, ДНК.

Однако резонансная кривая кварцевого резонатора часто значительно отличается от идеальной. Нежелательные отклики и искажения могут возникнуть из-за плохого качества кварцевого резонатора, из-за обработки поверхности пластины для приложений сенсирования и т. д. Необходимо: знать причины появления нежелательных искажений и устранять их по возможности; уметь отличать нежелательные искажения от искажений для приложений зондирования.

Рассмотрены причины появления искажений и нежелательных гармоник на резонансной кривой кварцевого резонатора, исследованы виды сигналов отрыва при отрыве аэрозольных частиц от поверхности пластины, предложены приемы, при помощи которых можно отделить сигналы от искажений и шумов, проведена оценка сил связывания аэрозольных частиц органических веществ (анисового альдегида, салицилового альдегида) с поверхностью кварцевого резонатора, что в дальнейшем будет необходимо для исследования поверхности этих аэрозольных частиц.

Научный руководитель – д-р хим. наук Дульцев Ф. Н.

## **Моделирование деформации и разрушения наночастиц методом молекулярной динамики**

Николаева А. В.

Томский политехнический университет

Метод молекулярной динамики (МД) – один из самых популярных методов математического моделирования вещества на атомном уровне. Метод основан на описании поведения атомов посредством решения системы уравнений движения, записанных для всех атомов. Для записи уравнений движения, необходимо задать потенциал межатомного взаимодействия – функцию, которая определяет энергию взаимодействия двух атомов в зависимости от расстояния между ними.

Для изучения материалов и их поведения в различных условиях, важно понимать механизмы процессов, происходящих с веществом. Разработка потенциалов для новых систем позволяет изучать как простые, так и многокомпонентные жидкости; изучаются как равновесные системы, так и неравновесные процессы, как вязкость, теплопроводность, диффузия и т.д. Важнейшим направлением приложений МД – является изучение дефектов в кристаллах. Распространение получает изучение с помощью МД процессов в твердых телах: пластической деформации, разрушения, диффузии, трения. Для нанотехнологий большой интерес представляет возможность использования МД для изучения процессов на поверхности твердых тел: перестроек поверхности, осаждения, а также для изучения структуры и свойств кластеров и наночастиц, больших молекул, в том числе биологических. Таким образом, математическое моделирование позволяет теоретически описать вещество, проверить различные предположения о механизмах процессов, рассчитать характеристики материала.

В настоящей работе в МД программе LAMMPS (Национальная лаборатория Сандия, США) построены модели металлических наночастиц алюминия и проведено моделирование процессов с ними: соударения частиц между собой, соударение частиц со стенкой, высокоскоростной нагрев частиц. В работе используется потенциал, рассчитанный методом погруженного атома. В результате расчета были получены видеочайлы, с помощью которых можно проанализировать механизмы процессов.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Чистякова Н. В.

## **Кинетика трансформации микроканалов на широких террасах поверхности Si(111)**

Петров А. С.

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

Экспериментальные исследования кинетики атомных процессов на кристаллической поверхности полупроводников (движение атомных ступеней, зарождение двумерных островков и т.д.) в условиях сублимации и эпитаксиального роста при высоких значениях температуры (~1300°C) затруднены, из-за сложности их визуализации современными методами диагностики. Альтернативой является изучение морфологических трансформаций искусственно созданных объектов на поверхности. Однако следует принимать во внимание взаимодействие структуры с вицинальными ступенями на поверхности, что усложняет теоритическое описание протекающих процессов. В данной работе предложена методика изучения релаксации 3D-объектов (микроканалов) на широких террасах кремния с поверхностной ориентацией (111), не содержащей вицинальных атомных ступеней, при термическом отжиге подложки.

Отработан процесс создания микроканалов методом фокусированного ионного пучка (Ga<sup>+</sup>) на широких террасах, полученных по патентованной методике [1] на поверхности Si(111). Проведены эксперименты по исследованию распада структур на широких террасах при резистивном нагреве переменным током при температурах 1220-1400°C. Обнаружено, что кинетика релаксации микроканавки меняется при достижении критического латерального размера, так как активируются процессы зарождения отрицательных (вакансионных) двумерных островков на дне микроканавки, которые в свою очередь замедляет динамику распада структуры. Предложена теоритическая модель, описывающая изменения латеральных размеров микроканавки.

Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 14-22-00143).

---

[1] Ситников С. В., Косолюбов С. С., Щеглов Д. В., Латышев А. В. Способ формирования атомно-гладкой поверхности твердотельного материала, патент №2453874.

Научные руководители – д-р. физ.-мат. наук, акад. РАН Латышев А. В.,  
мл. науч. сотр. Ситников С. В.

## Разработка высокочастотного резонатора для управления спином электрона в оптически детектируемых NV-центрах алмаза

Петров Р. Г.

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

Существует более 200 разнообразных дефектов в кристаллической решетке алмаза, одним из которых является NV-центр. При замещении атома четырехвалентного углерода пятивалентным азотом (N) в кристалле алмаза появляются дополнительные электроны, которые концентрируются в образовавшейся вакансии (V). Так образуется дефект кристаллической решетки алмаза – NV-центр (англ. nitrogen-vacancy center). Физика его процессов на практике соответствует физике процессов атома, будь тот локализован в кристаллической решетке алмаза : спины электронов атома азота легко поддаются воздействию: светом; магнитным, электрическим и микроволновыми полями; что дает возможность зашифровывать данные или кубиты изменяя по-разному электронные спины. Дефект может иметь как отрицательный (в среднем 70 %), так нейтральный (в среднем 30 %) заряд. NV-центры, по своей природе, могут испускать стабильный поток одиночных фотонов, всего лишь при стандартных условиях внешней среды. Центр активно поглощает зеленый свет на длине волны  $\lambda = 532$  нм и демонстрирует стабильную флюоресценцию в красном диапазоне длин волн 630–800 нм с пиком в нулевой фоновой линии. Что позволяет оптически детектировать спиновое состояние. Парамагнетизм отрицательно заряженного центра означает расщепление спинового мультиплетта в отсутствие внешнего магнитного поля и делает возможным выделение подуровней с  $m = 0$  и  $m = -1$  (или  $+1$ ) в логическое подпространство. Величина расщепления для основного орбитального состояния составляет  $Dg = 2.87$  ГГц, что позволяет осуществлять переходы  $|m = 0\rangle$  и  $|m = -1\rangle$  (или  $+1$ ) между логическими состояниями, то есть выполнять однокубитные квантовые операции, воздействуя на центр резонансным микроволновым импульсом. Чтобы накрыть полем исследуемый объем образца, необходимо использовать разрезной кольцевой резонатор. Оптимизация размеров с помощью приведенных расчетов позволило повысить эффективность взаимодействия микроволновых волн и NV-центров более чем в 8 раз.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Сафронов Л. Н.

## Распределение концентрации адатомов на ультраширокой террасе поверхности Si(111)

Рыбин Н. Е.

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

Методами *in situ* сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии (СВВ ОЭМ) и *ex situ* атомно-силовой микроскопии (АСМ) исследовано распределение концентрации адсорбированных атомов (адатомов) на круглых террасах поверхности Si(111) в температурном интервале  $T = 1000\text{--}1100^\circ\text{C}$ .

Методом ионного травления низкоэнергетическим пучком  $\text{Ar}^+$  на поверхности образца Si(111) создавалась лунка. Дальнейший высокотемпературный отжиг образца пропусканием электрического тока в сверхвысоком вакууме ( $T = 1300^\circ\text{C}$ ) приводил к формированию системы концентрических моноатомных ступеней. При понижении температуры до  $T = 1000\text{--}1100^\circ\text{C}$  на дне лунки формировалась круглая ультраширокая терраса диаметром  $\sim 100$  мкм, ограниченная замкнутой моноатомной ступенью. В процессе сублимации на террасе формировалось неравновесное распределение адатомов. Затем температура подложки скачком уменьшалась до  $T = 750^\circ\text{C}$ , и на поверхности происходило зарождение доменов сверхструктуры  $(7\times 7)$  с низкой концентрацией адатомов. Адатомы группировались между доменами и образовывали области высотой 0,1 нм.

На основе *ex situ* АСМ-анализа площади поверхности, занятой сверхструктурными доменами, изучено распределение адатомов на террасе, существовавшее при  $T = 1000\text{--}1100^\circ\text{C}$ . Количественный анализ профиля концентрации адатомов позволил экспериментально определить длину диффузии и время жизни адатома до десорбции, их коэффициент диффузии и равновесную концентрацию вблизи ступени в исследованном диапазоне  $T$ . Полученные данные позволили оценить энергию активации поверхностной диффузии (1,3 эВ) и энергию формирования адатома при выходе из ступени (0,6 эВ) на поверхности Si(111)-(1 $\times$ 1).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (проект № 14-22-00143) на оборудовании ЦКП «Наноструктуры» в рамках научной школы НШ-10211.2016.8.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук, н. с. Родякина Е. Е.,  
мл. науч. сотр. Роголо Д. И.

## Исследование эпитаксиального роста германия методом дифракции электронов

Серохвостов В. Ю., Пицагин А. А., Дирко В. В.

Национальный исследовательский Томский государственный университет

В настоящее время одним из основных методов получения перспективных наногетероструктур для оптоэлектроники является метод молекулярно-лучевой эпитаксии (МЛЭ). Формирование островков Ge на поверхности Si во многом определяется скоростью роста первоначального смачивающего слоя германия. Анализ физических процессов образования квантовых точек невозможен без определения основных факторов определяющих процессы синтеза.

К важным преимуществам МЛЭ относится возможность использования ряда прецизионных методов контроля за процессом *in situ* во время роста слоя. Метод дифракции быстрых электронов (ДБЭ) используется для контроля состояния поверхности подложки и растущего слоя и даёт возможность судить о структуре поверхности по дифракционной картине на флуоресцентном экране. В последнее время ДБЭ стали дополняться аппаратурой для регистрации интенсивности рефлекса, отражённого поверхностью электронного луча. При этом используется рефлекс, получаемый в результате зеркального отражения от поверхности. Наблюдение за интенсивностью рефлексов позволяет контролировать не только структуру поверхности роста, но и скорость напыления, основываясь на осцилляционном характере изменения интенсивности любой дифракционной особенности, в первую очередь, отраженного луча при двумерном послыном росте, который наблюдается в случае малого рассогласования периодов решеток.

В работе была проведена серия экспериментов по напылению пленки Ge на подложку Si(111). Во время всего процесса эксперимента с помощью видеокамеры регистрировалось изменение интенсивности картины дифракции. После обработки картин дифракции были построены зависимости интенсивности рефлексов ДБЭ от времени. Проведен анализ зависимости скорости роста эпитаксиальных пленок Ge от параметров установки. Показано, что при изменении тока эмиссии от 180 до 210 мА скорость роста Ge увеличивается от 1,4 до 6,3 Å/мин. (0,4 – 1.8 БС Ge в минуту).

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

**Исследование спектров ЭПР алмазов, содержащих примесный азот**

Сибиряков Н. Е.

Новосибирский государственный университет

Современные исследования по созданию элементов квантовых компьютеров, кубитов, сосредоточены вокруг NV-центров. Азот, содержащийся в примесных количествах в искусственно выращенных алмазах, как раз образуют такие центры. Кроме того, люминесцентные свойства этих центров могут быть использованы в приложениях квантовой оптики. Поэтому изучение свойств алмазов с азотными центрами представляет актуальную научную задачу.

В данной работе были исследованы спектры ЭПР монокристалла алмаза, содержащего примесный азот в форме P1 центров (замещающий атом азота). Данный дефект характеризуется электронным состоянием со спином  $S = 1/2$ , сверхтонкой структурой от одного атома азота и аксиальной симметрией.

Проведенные исследования методом ЭПР кристаллов алмаза, содержащих примесный азот, показали, что примесный азот занимает положение углерода в решетке алмаза (P1 центр), а неспаренный электрон определяет парамагнетизм этого дефекта.

Для данного дефекта было проведено исследование спектра ЭПР в зависимости от положения кристалла во внешнем магнитном поле. Эти зависимости в пределах погрешности совпадают с теоретически предсказанными. Так же измерены константы сверхтонкого взаимодействия,  $A_{||} = 40.8$  гаусс и  $A_{\perp} = 29.2$  гаусс. По этим данным рассчитана электронная плотность, сосредоточенная на атоме азота,  $P_N = 0.246$ , параметр sp-гибридизации  $\lambda = 1.949$ . Все полученные величины совпадают с результатами более ранних работ. Так же по результатам исследования измерены валентные углы  $\theta = 107.9^\circ$  и  $\phi = 111^\circ$ . Это соответствует удлинению одной из N-C связей, что было получено ранее другими исследователями.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Надолинный В. А.

## Несмачиваемость поверхностей Si при осаждении Ge при высоких температурах

Сунь Х. Т.

Новосибирский государственный университет

Один из эффективных методов модификации слоёв гетероструктур основан на использовании эффекта несмачиваемости. Примерами реализации эффекта несмачиваемости являются структуры со слоями Si или Ge, выращенными на подложках Si, покрытых слоем диоксида кремния ( $\text{SiO}_2$ ). Практическая важность эффекта несмачиваемости состоит в возможности простого и быстрого изменения морфологии поверхности с целью радикального изменения её свойств по отражению и поглощению света.

Мы изучаем образование островков субмикронного размера при осаждении Ge на поверхность Si(100) при высоких температурах в диапазоне 800–950 °С. Атомы Ge, осажденные на поверхность Si при таких высоких температурах, с одной стороны перемешиваются с атомами Si с диффузией в подложку, а с другой – образуют на поверхности островки. Конкуренция между этими двумя процессами приводит к так называемым критическим условиям. Они означают, что при каждой температуре скорость осаждения Ge должна быть выше, чем скорость диффузии Ge в подложку Si для формирования островков на поверхности.

Когда скорость осаждения Ge была значительно выше критической, нами наблюдалась несмачиваемость поверхности Si(100) слоями SiGe. При этом образовывались островки в форме близкой к полусферической. Контактный угол между островком и плоскостью поверхности подложки достигал значения больше 90°. Такие островки могут быть эффективными для генерации оптических резонансов при рассеянии света.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Шкляев А. А.



**Изучение электронной структуры собственных дефектов  
в оксиде тантала**

Фелингер Е. А.

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

Оксид тантала является перспективным материалом для применения в микро- и наноэлектронике в качестве запоминающей среды в элементах флэш памяти и резистивной памяти. Электронные свойства диэлектриков в значительной степени определяют собственные дефекты: вакансии, междоузельные атомы, атомы замещения, дефекты по Френелю. Для установления способности собственных дефектов в  $Ta_2O_5$  участвовать в локализации заряда, а также в резистивном переключении, в настоящей работе изучаются особенности энергетического спектра, которые эти дефекты обуславливают. Эти особенности и есть электронная структура дефектов.

В работе изучение электронной структуры дефектов осуществляется методом квантово-химического моделирования с помощью теории функционала плотности с гибридным обменно-корреляционным функционалом B3LYP. Достоинство подхода заключается в том, что он дает близкое к экспериментальному значение ширины запрещенной зоны оксида тантала. В качестве проверки теоретической модели при описании данного материала происходит сравнение соответствующих расчетных результатов с экспериментальными данными рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии. Рассчитываются спектры полной и парциальной плотности электронных состояний в кристаллической структуре  $Ta_2O_5$  в  $\lambda$ -фазе.

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Перевалов Т. В.

## **Гистерезис вероятности выхода электронов в вакуум при адсорбции цезия на поверхность GaAs**

Хорошилов В. С.

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

Интенсивность фотоэмиссии электронов из кристалла в вакуум определяется эффективным электронным сродством – величиной поверхностного потенциального барьера и вероятностью выхода в вакуум попавших на поверхность фотоэлектронов. Управление эффективным сродством *p*-GaAs производится путём адсорбции на его поверхность цезия. Изменение структуры поверхности GaAs при адсорбции Cs может сказаться на вероятности выхода фотоэлектрона в вакуум. Известно, например, что при увеличении Cs покрытия между адатомами возникает притяжение за счёт образования латеральных металлических связей, вследствие чего на поверхности Cs/GaAs происходит фазовый переход от отдельных адатомов к двумерным металлическим Cs кластерам. Дополнительное рассеяние эмитируемых электронов на Cs кластерах может уменьшить вероятность выхода в вакуум. С другой стороны, можно предположить, что формирование металлических Cs кластеров будет способствовать выходу в вакуум благодаря экранированию флуктуаций поверхностного потенциала. Цель данной работы состоит в выяснении того, как влияет фазовый переход в цезиевом слое на вероятность выхода электронов в вакуум, методом спектроскопии квантового выхода фотоэмиссии с поверхности *p*-GaAs(001) при различных Cs покрытиях. Измерения показали наличие гистерезиса в зависимостях вероятности выхода горячих и термализованных электронов от величины эффективного электронного сродства. Обнаружено уменьшение вероятности выхода при нанесении Cs покрытия свыше половины монослоя, по сравнению с поверхностью с меньшей концентрацией нанесённого цезия и таким же эффективным сродством, что обусловлено, предположительно, увеличением коэффициента отражения эмитируемых электронов от поверхности Cs/GaAs или рассеянием электронов на цезиевых кластерах.

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

**Эффекты проскальзывания фазы в сверхпроводящих проволоках  
нитрида титана**

Черкасов Д. А.

Институт физики полупроводников им. А. А. Ржанова СО РАН  
Новосибирский государственный университет

В работе исследуются сверхпроводящие свойства квазиодномерных проволок нитрида титана. В частности, представлены результаты экспериментального исследования низкотемпературных транспортных свойств проволок шириной 50 нм, изготовленных на основе плёнки нитрида титана толщиной 3.6 нм и 5 нм, при этом сверхпроводящая длина когерентности образцов составляет  $\xi \approx 10$  нм.

Проведен анализ результатов в рамках моделей термоактивированного и квантового проскальзывания фазы. Обнаружено качественное согласие экспериментальных данных с теорией.

Научные руководители – канд. физ.-мат. наук Миронов А. Ю.,  
мл. науч. сотр. Постолова С. В.

## Влияние электрического тока на морфологию поверхности Si(111) при осаждении Ge при высоких температурах

Чжэн С. Ц.

Новосибирский государственный университет

Формирование полупроводниковых гетероструктур происходит в результате их самоорганизации, направленной на минимизацию их свободной энергии. Возможности этого процесса часто ограничены кинетическими факторами, то есть, скоростями физико-химических процессов. Естественно предположить, что использование высоких температур будет способствовать более быстрому достижению минимальной энергии гетероструктуры. Кроме этого, одним из важных воздействий, влияющих на морфологию поверхности, является электрический ток, протекающий по образцу.

Нами исследована морфология поверхности Si(111) при осаждении различных толщин Ge при нагреве образца пропусканием переменного или постоянного электрического тока при температуре 900 °С. Осаждение Ge приводило к слиянию атомных ступеней и образованию ступеней высотой в несколько межплоскостных расстояния. Высота слившихся ступеней имела сильную зависимость от направления потока электронов при использовании постоянного тока.

В случае постоянного тока на адатомы действует поток движущихся электронов и электрическое поле  $E$  силой  $F_{дрейф} = Z_{эфф} \times E$ , где  $Z_{эфф}$  – эффективный электрический заряд на адатоме. Анализ результатов показывает, что  $Z_{эфф}$  является положительным и соответствующая ему сила является доминирующей при движении адатомов через край (ребро) ступени. Использование электрического тока позволяет контролировать морфологию поверхности при формировании Si/Ge гетероструктур.

Научный руководитель – д-р физ.-мат. наук Шкляев А. А.

## АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ

Аллахвердян В. А. ....	5	Назариков Г. И. ....	23
Анфилофьев В. В. ....	7	Недомолкина А. А. ....	24
Атовуллаев Т. ....	8	Некрасов Д. В. ....	25
Баркалов Л. Д. ....	9	Николаева А. В. ....	26
Белослудцева А. А. ....	9	Петров А. С. ....	27
Брудный П. А. ....	10	Петров Р. Г. ....	28
Бурдастых М. В. ....	11	Пицагин А. А. ....	15, 30
Васильев Н. Н. ....	12	Рыбин Н. Е. ....	29
Дергачёв М. А. ....	5	Серохвостов В. Ю. ....	15, 30
Дзюбина Л. Л. ....	13	Сибиряков Н. Е. ....	31
Дирко В. В. ....	15, 30	Сунь Х. Т. ....	32
Забелич Б. Ю. ....	16	Туктамышев А. Р. ....	22
Зятиков И. А. ....	17	Фелингер Е. А. ....	33
Ким С. В. ....	18	Хорошилов В. С. ....	34
Ковалев Е. В. ....	19	Черкасов Д. А. ....	35
Мальшева Е. Д. ....	20	Чжэн С. Ц. ....	36
Маншуров Ш. Т. ....	21	Шелепова С. Ю. ....	7
Мурашов В. В. ....	22	Шульга А. Ю. ....	17

## СОДЕРЖАНИЕ

Аллахвердян В. А., Дергачёв М. А.....	5
Анфилофьев В. В., Шелепова С. Ю. ....	7
Атовуллаев Т.....	8
Белослудцева А. А., Баркалов Л. Д. ....	9
Брудный П. А. ....	10
Бурдастых М. В.....	11
Васильев Н. Н.....	12
Дзюбина Л. Л. ....	13
Дирко В. В., Серохвостов В. Ю., Пицагин А. А. ....	15
Забелич Б. Ю. ....	16
Зятиков И. А., Шульга А. Ю.....	17
Ким С. В. ....	18
Ковалев Е. В. ....	19
Мальшева Е. Д.....	20
Маншуров Ш. Т. ....	21
Мурашов В. В., Туктамышев А. Р.....	22
Назариков Г. И. ....	23
Недомолкина А. А. ....	24
Некрасов Д. В.....	25
Николаева А. В. ....	26
Петров А. С. ....	27
Петров Р. Г. ....	28
Рыбин Н. Е.....	29
Серохвостов В. Ю., Пицагин А. А., Дирко В. В. ....	30
Сибиряков Н. Е. ....	31
Сунь Х. Т. ....	32

Фелингер Е. А. ....	33
Хорошилов В. С. ....	34
Черкасов Д. А. ....	35
Чжэн С. Ц. ....	36
<b>АВТОРСКИЙ УКАЗАТЕЛЬ</b> .....	<b>37</b>

Научное издание

МАТЕРИАЛЫ  
55-Й МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНОЙ  
СТУДЕНЧЕСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

МНСК–2017

КВАНТОВАЯ ФИЗИКА

Материалы конференции публикуются в авторской редакции

Подписано в печать 31.03.2017 г. Формат 60x84/16

Уч.-изд. л. 2,5. Усл. печ. л. 2,3.

Тираж 100 экз. Заказ № 62.

Издательско-полиграфический центр НГУ  
630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, 2