

ISSN 1563-0315  
Индекс 75877; 25877

ӘЛ-ФАРАБИ атындағы ҚАЗАҚ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ

# ХАБАРШЫ

Физика сериясы

---

КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени АЛЬ-ФАРАБИ

# ВЕСТНИК

Серия физическая

---

AL-FARABI KAZAKH NATIONAL UNIVERSITY

# RECENT CONTRIBUTIONS TO PHYSICS

---

№4 (67)

Алматы  
«Қазақ университеті»  
2018



# ХАБАРШЫ

ФИЗИКА СЕРИЯСЫ №4 (67)

ISSN 1563-0315  
Индекс 75877; 25877



25.11.1999 ж. Қазақстан Республикасының Мәдениет, ақпарат және қоғамдық келісім министрлігінде тіркелген

Қуәлік №956-Ж.

Журнал жылына 4 рет жарыққа шығады

## ЖАУАПТЫ ХАТШЫ

**Иманбаева А.К.**, ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

Телефон: +7(727) 377-33-46

E-mail: akmaral@physics.kz

## РЕДАКЦИЯ АЛҚАСЫ:

**Давлетов А.Е.**, ф.-м.ғ.д., профессор – ғылыми редактор (Қазақстан)

**Лаврищев О.А.**, ф.-м.ғ.к. – ғылыми редактордың орынбасары (Қазақстан)

**Әбишев М.Е.**, ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

**Асқарова Ә.С.**, ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

**Буртебаев Н.**, ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

**Дробышев А.С.**, ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

**Жаңабаев З.Ж.**, ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

**Косов В.Н.**, ф.-м.ғ.д., профессор (Қазақстан)

**Буфенди Лайфа**, профессор (Франция)

**Иващук В.Д.**, ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей)

**Ишицука Эцуо**, доктор (Жапония)

**Лунарска Элина**, профессор (Польша)

**Сафарик П.**, доктор (Чехия)

**Тимошенко В.Ю.**, ф.-м.ғ.д., профессор (Ресей)

**Кеведо Эрнандо**, профессор (Мексика)

## ТЕХНИКАЛЫҚ ХАТШЫ

**Дьячков В.В.**, ф.-м.ғ.к. (Қазақстан)

Физика сериясы – физика саласындағы іргелі және қолданбалы зерттеулер бойынша бірегей ғылыми және шолу мақалаларды жариялайтын ғылыми басылым.



## Ғылыми басылымдар бөлімінің басшысы

*Гульмира Шаккозова*

Телефон: +77017242911

E-mail: Gulmira.Shakkozova@kaznu.kz

## Компьютерде беттеген

*Айгүл Алдашева*

## Жазылу мен таратуды үйлестіруші

*Керімқұл Айдана*

Телефон: +7(727)377-34-11

E-mail: Aidana.Kerimkul@kaznu.kz

## ИБ № 12429

Пішімі 60x84 <sup>1</sup>/<sub>8</sub>. Көлемі 9,6 б.т. Офсетті қағаз.

Сандық басылыс. Тапсырыс № 7926. Таралымы 500 дана.

Бағасы келісімді.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің

«Қазақ университеті» баспа үйі.

050040, Алматы қаласы, әл-Фараби даңғылы, 71.

«Қазақ университеті» баспа үйінің баспаханасында басылды.

© Әл-Фараби атындағы ҚазҰУ, 2018

1-бөлім  
**ТЕОРИЯЛЫҚ ФИЗИКА.  
ЯДРО ЖӘНЕ ЭЛЕМЕНТАР БӨЛШЕКТЕР  
ФИЗИКАСЫ. АСТРОФИЗИКА**

---

Section 1  
**THEORETICAL PHYSICS.  
NUCLEAR AND ELEMENTARY PARTICLE  
PHYSICS. ASTROPHYSICS**

---

Раздел 1  
**ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА.  
ФИЗИКА ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ.  
АСТРОФИЗИКА**

IRSTI 34.19.23; 29.15.35; 29.15.15; 29.03.77; 28.17.23

**Dyachkov V.V.\*, Zaripova Yu.A., Yushkov A.V., Shakirov A.L.,  
Bigeldiyeva M.T., Dyussebayeva K.S., Abramov K.E.**

National open-type nanotechnology laboratory (NNLOT),  
al-Farabi Kazakh National University,  
Kazakhstan, Almaty, \*e-mail: slava\_kpss@mail.ru

## **STUDY OF DISTRIBUTION OF BETA-POLLUTION IN THE CITY OF ALMATY**

The present work is devoted to the study of the distribution of beta activity of natural radionuclides in the surface soil of Almaty in the spring. The soil samples were collected during the period April-May 2018 in different parts of the city of Almaty. Sample preparation of soil samples was limited to soil selection, which was dried overnight, crushed, its residual moisture was measured, and its beta spectrum was further measured. The exposure time of the measurements of one spectrum averaged 90 minutes. In addition to the background beta particles generated by cosmic rays, the influence on the intensity of the beta spectrum is exerted by the existence of temporal variations in radon emanation, and within a day the radon activity in air can vary in a relatively wide range. Consequently, the concentration of daughter decay products (DDPR) on aerosols of air will affect the background of beta particles. In this connection, after each measurement of the soil sample, background spectra of beta particles were measured. As a result of the performed measurements and analysis of the intensity distribution of beta contamination of surface soil in different parts of Almaty, the emergence of radionuclide radionuclides of radon DDPR in the surface layer of the atmosphere and atmospheric precipitation was determined, which is mainly due to aerosol particles. In turn, radon atoms emanating from the lower soil layers coagulate with aerosol particles. The degree of concentration of beta radionuclides of radon DDPR depends on the chemical composition of the soil cover, on meteorological conditions and on its own chemical properties, on which the ability of migration and accumulation in the surface soil layer depends. The obtained integral values of beta radionuclides of radon DDPR show the spatial fractal spread and correspond to the literature data taking into account abundant precipitation during the sampling period.

**Key words:** daughter products of radon decay; beta activity; natural radionuclides; beta contamination; natural background radiation.

Дьячков В.В. \*, Зарипова Ю.А., Юшков А.В., Шакиров А.А.,  
Бигельдиева М.Т., Дюсебаева К.С., Абрамов К.Е.

әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті жанындағы  
ашық түрдегі ұлттық нанотехнологиялық зертхана,  
Қазақстан, Алматы қ., \*e-mail: slava\_kpss@mail.ru

### **Алматы қаласының бета-ластануының таралуын зерттеу**

Бұл жұмыс Алматы қаласының жер бетіндегі топырақтағы табиғи радионуклидтердің бета-белсенділігінің көктем кезеңіндегі таралуын зерттеуге арналған. Топырақ үлгілері 2018 жылдың сәуір-мамыр айларында Алматы қаласының әртүрлі бөліктерінде алынды. Топырақ үлгілерінен сынама дайындау, бір тәулік ішінде кептіріліп, ұсақталған, оның қалдық ылғалдылығы өлшенген және одан әрі оның бета-спектрі өлшенген топырақты іріктеп алуға негізделді. Бір спектрді өлшеудің экспозициялық уақыты орташа алғанда 90 минутты құрады. Ғарыш сәулелері генерацияланатын фондық бета-бөлшектерден басқа бета-спектрдің қарқындылығына радон эманациясының уақытша вариациясының болуы әсер етеді және бір тәулік ішінде ауада радон белсенділігінің мәні салыстырмалы кең ауқымда өзгеруі мүмкін.

Осының салдарынан ауа аэрозольдарында ыдыраудың ұрпақтық өнімдерінің (БІҰӨ) шоғырлануы бета-бөлшектердің фонна әсер етеді. Осыған байланысты, топырақ үлгісінің әрбір өлшемінен кейін бета-бөлшектердің фондық спектрін өлшеу жүргізілді. Орындалған өлшеулер мен талдау нәтижесінде Алматы қаласының әртүрлі аудандарында, негізінен аэрозоль бөлшектері есебінен жүзеге асырылатын, атмосфераның жерге жақын қабатында және атмосфералық шөгінділерде радон ыдырауының ұрпақтық өнімдерінің табиғи радионуклидтері пайда болғандығы анықталды. Өз кезегінде, төменгі топырақ қабаттарынан эманацияланған радон атомдары аэрозоль бөлшектерімен коагуляцияланады (біріктіріледі). Радон ыдырауының ұрпақтық өнімдері бета-радионуклидтерінің шоғырлану дәрежесі топырақ жамылғысының химиялық құрамына, метеорологиялық жағдайларға және жеке химиялық қасиеттеріне байланысты, ал ол өз кезегінде жер бетіндегі топырақ қабатында болатын көшіп-қону және аккумуляциялану қабілетіне байланысты. Радон ыдырауының ұрпақтық өнімдері бета-радионуклидтерінің алынған интегралдық мәндері кеңістіктік фракталдық шашырауды көрсетеді және сынама алу кезеңінде мол жауын-шашынды есепке ала отырып, әдеби деректерге сәйкес келеді.

**Түйін сөздер:** радон ыдырауының ұрпақ өнімдері; бета-белсенділік; табиғи радионуклидтер; бета-ластану; табиғи радиациялық фон.

Дьячков В.В.\* , Зарипова Ю.А., Юшков А.В., Шакиров А.А.,  
Бигельдиева М.Т., Дюсебаева К.С., Абрамов К.Е.

Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа  
Казахского национального университета имени аль-Фараби,  
Казахстан, г. Алматы, \*e-mail: slava\_kpss@mail.ru

### Изучение распределения бета-загрязненности города Алматы

Настоящая работа посвящена изучению распределения бета-активности природных радионуклидов находящихся в поверхностной почве г. Алматы в весенний период. Заборы образцов почвы были выполнены в период апрель-май 2018 года в различных частях города Алматы. Пробоподготовка почвенных образцов сводилась к отбору почвы, которая в течение суток просушивалась, измельчалась, измерялась ее остаточная влажность и далее измерялся ее бета-спектр. Время экспозиции измерений одного спектра в среднем составляло 90 мин. Помимо фоновых бета-частиц, генерируемых космическими лучами, влияние на интенсивность бета-спектра оказывает существование временных вариаций эманации радона, и в течение суток значение активности радона в воздухе может меняться в сравнительно широких пределах. Вследствие этого концентрация дочерних продуктов распада (ДПР) на аэрозолях воздуха будет влиять на фон бета-частиц. В связи с этим, после каждого измерения почвенного образца, выполнялись измерения фонового спектра бета-частиц. В результате выполненных измерений и анализа распределения интенсивности бета-загрязненности поверхностной почвы в различных районах города Алматы было определено возникновение природных радионуклидов ДПР радона в приземном слое атмосферы и атмосферных осадках, которое осуществляется, в основном, за счет аэрозольных частиц. В свою очередь атомы радона, эманлирующие из нижних почвенных слоев, коагулируют с аэрозольными частицами. Степень концентрации бета-радионуклидов ДПР радона зависит от химического состава почвенного покрова, от метеорологических условий и от собственных химических свойств, от которых зависит способность миграции и аккумуляции в поверхностном почвенном слое. Полученные интегральные значения бета-радионуклидов ДПР радона показывают пространственный фрактальный разброс и соответствуют литературным данным с учетом обильных осадков в период забора проб.

**Ключевые слова:** дочерние продукты распада радона; бета-активность; природные радионуклиды; бета-загрязненность; природный радиационный фон.

### Introduction

The study of the distribution of natural radionuclides in the atmosphere and earth, with the help of which the radiation background of the earth is formed, is an urgent task. This is due, above all, to cancer caused by radionuclides that enter the human body through the respiratory tract and digestive system. With internal irradiation of the human body, such natural radionuclides as potassium-40, which

are mainly contained in the nervous and muscular tissues, radium deposited in bone tissue, radon isotopes and its decay products (DDPR), accumulating in the respiratory tract, and radioactive isotopes of carbon-14, rubidium-87 [1]. For example, radon has long been recognized as the cause of lung cancer and in 1986 it was identified by the World Health Organization as a carcinogen for the lungs (WHO, 1986, IARC, 1988). The main source of information about the risks of lung cancer caused by radon was

epidemiological studies of miners (ICRP, 1993), and later studies provided informative data on risks at low levels of exposure (for example Lubin et al., 1997; NRC, 1999; EPA, 1999, 2003; Tomášek et al., 2008).

It was established that the contribution of internal irradiation (1.34 mSv / year) in the effective equivalent dose capacity is approximately 2 times higher than the contribution of external irradiation (0.65 mSv / year). Among the radionuclides that make the greatest contribution to the dose rate of internal irradiation, short-lived decay products of radon-222 (about 60%) are on the first place. Next are potassium-40 (13%), radon-220 (13%), and lead-210, polonium-210 (8%).

Determination of DDPR activity in soil is directly related to radon emanation, which, in turn, has a direct effect on the lungs and airways of a person. The activity of radon isotopes and their DPR in air, soil and water, as well as the doses received by a person during their irradiation are regulated by our legislation [2-6].

### Method and results of measurements

In this paper, samples of soil from the surface layer of the earth were collected from various places in Almaty. For the period of sampling from March to May 2018 in Almaty, the maximum precipitation was observed, in March – 74 mm; April – 120 mm; May 129 mm at an average annual value of 40 mm. 18 soil samples were taken at a depth of 0-5 cm from the surface in various locations and parts of the city to measure their beta spectra. The measurement procedure is based on recording the spectra of beta radiation emitted by the substance of the object under study. To measure the activity of radionuclides in the studied soil samples, a scintillation beta spectrometer of the “SCS-99” Sputnik type was used. Sampling of soil samples was as follows: the selected soil was dried for 24 hours, then it was crushed, its moisture content was measured and then it was poured into a measuring container with a uniform layer with a diameter of 70 mm. The average exposure time was 90 minutes. In addition to the background beta particles generated by cosmic rays [7, 8], the influence on the intensity of the beta spectrum is exerted by the existence of temporal variations in radon emanation, as we showed in [9], and within a day the radon activity in air can vary in comparative wide limits. As a result, the concentration of DDPR on aerosols of air will affect the background of beta particles. In this connection,

after each measurement of the soil sample, the background spectrum of the beta particles was measured.

Figures 1, 2 show the background beta spectrum and the beta spectrum of the soil sample. Figure 3 shows the spectrum of the excess of the flux of beta particles from the soil sample over the background beta-particles flux. As a result, the beta spectra of all samples were processed and their integral values are presented in Table 1. The map of beta-contamination distribution of Almaty was constructed for integral values (Fig. 4). Preliminary results of distribution of beta contamination in Almaty were published in [10]. All integral values do not exceed the regulated level of 200 parts / (min·cm<sup>2</sup>) [2-6].

It can be seen from Figures 1 and 2 that the beta spectrum is of a complex nature. This is explained by the fact that several successive beta decays occur in the sample. In addition, the sample consists of a complex composition of natural beta radionuclides. So, in addition to the DDPR, in the sample of the soil surface layer there are natural beta radionuclides of potassium-40 and rubidium-87. It can be seen from the figure that the excess of the beta activity of the samples over the background is quite high. Excess of activity of the sample over the background, on average, is 10-20%. In this case, the shape of the spectrum, as shown in Fig. 3, is different for different samples. This indicates that the concentration of these or other radionuclides in the samples is different. Such a distribution of different beta-radionuclides in the samples is fractal.

To monitor the measured beta activity of the samples, Table 1 shows the sample mass and its moisture content after sample preparation. It can be seen that the controlled quantities vary in a small range. This, in turn, has small errors in the measurement of beta spectra of samples, which, in this paper, can be neglected.

Thus, the radionuclides of radon DDPR in the surface layer of the atmosphere and atmospheric precipitation are mainly due to aerosol particles. In turn, radon atoms emanating from the lower soil layers coagulate with aerosol particles. Accumulation of beta radionuclides of radon DDP depends on the chemical composition of the soil cover, on meteorological conditions and on its own chemical properties, on which the ability of migration and accumulation in the surface soil layer depends. The obtained integral values of beta radionuclides of radon DDPR show the spatial fractal spread and correspond to the literature data taking into account abundant precipitation during the sampling period.

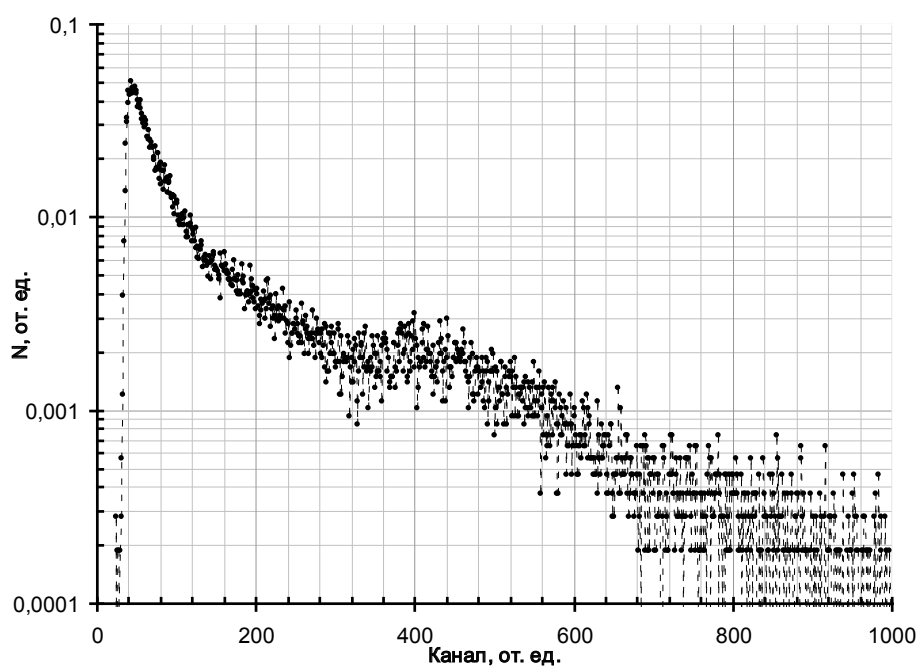


Figure 1 – Background beta spectrum

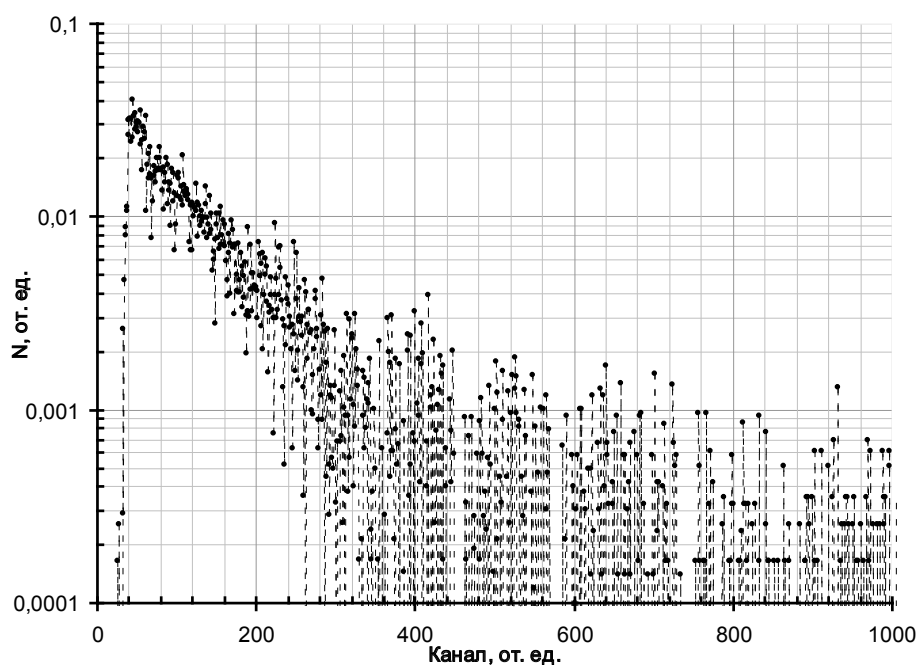
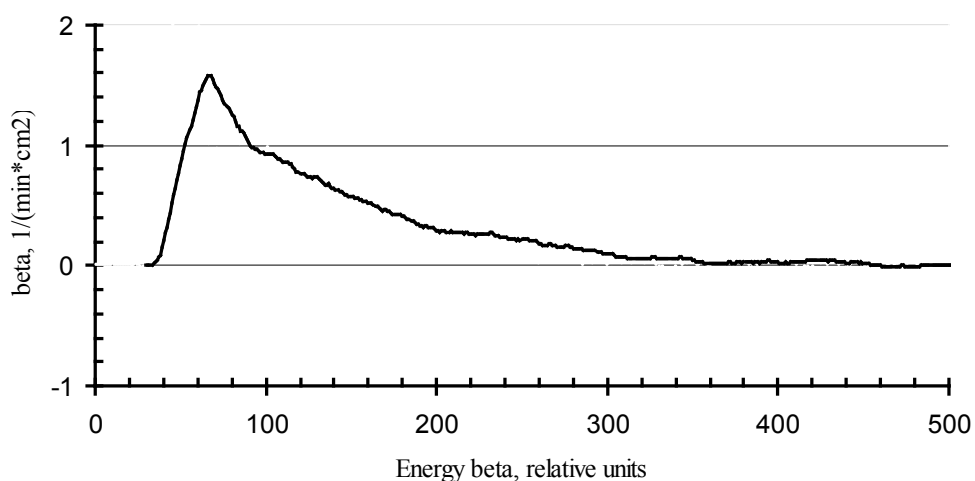


Figure 2 – A typical beta spectrum of a soil sample



**Figure 3** – Exceeding the beta spectrum of soil sample No. 1 over the background

**Table 1** – Integral values of beta spectra of soil samples

No. sample	Weight of samples, grams	Humidity, %	N/(min×cm <sup>2</sup> )
1	42	6	153
3	42	2	66
4	41	4	76
5	40	3	181
6	39	6	46
7	44	4	82
8	46	3	81
9	44	3	107
10	43	3	61
11	45	3	47
12	45	3	168
14	41	5	54
15	46	3	46
16	43	3	63
17	46	4	70
18	44	2	85



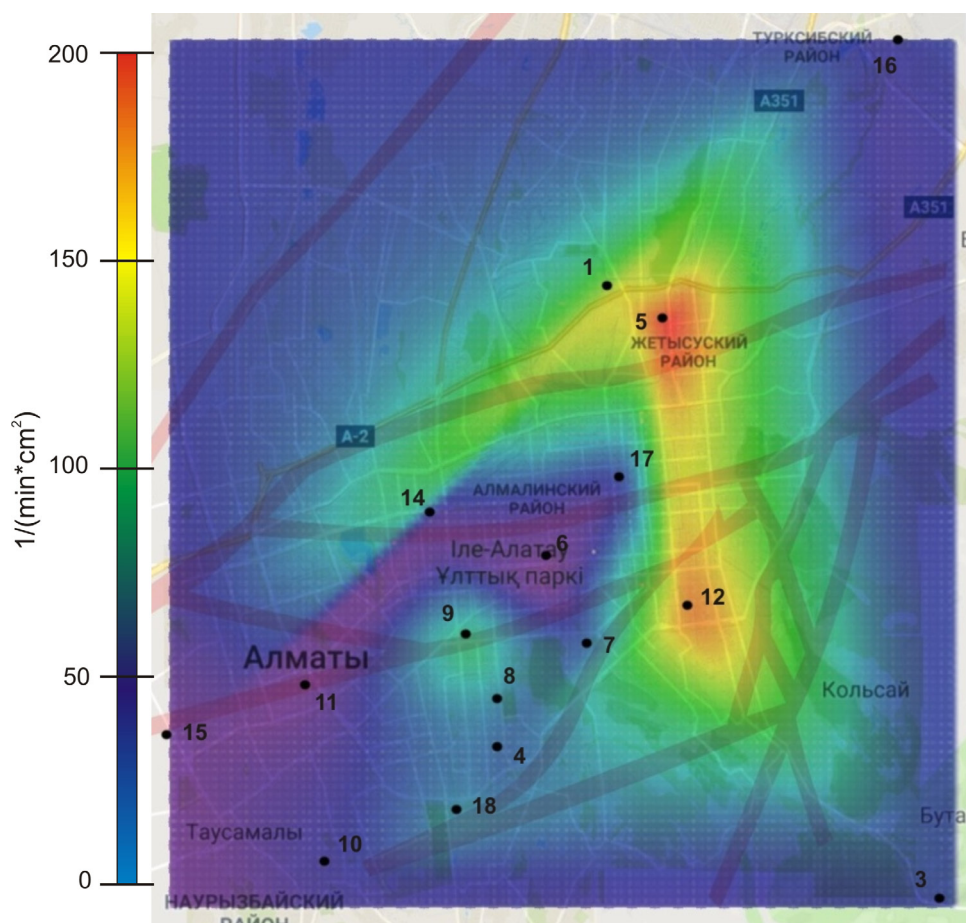


Figure 4 – Distribution of contaminants of beta contamination in Almaty

Since the radiation contamination of soil samples was studied, this distribution is scalar, but in the period of elevated precipitation levels due to flat flushing and penetration into the soil, this distribution should be considered as a vector distribution. The latter circumstance substantially changes the methodology for measuring radiation contamination, in which weather conditions must be taken into account. Taking into account the above, the obtained numerical characteristics of the radiation distribution of beta-radionuclides are

of great practical importance when planning both agricultural works and residential buildings.

#### Acknowledgments

This work was supported by the state grant financing of basic research (project No. IRN AP05131884 “Fundamental research of the mechanisms of formation of nanoscale onco-radiogenic structures in the body and development of anticancer express devices for their detection”).

#### References

- 1 Левин М.Н., Негроров О.П., Гитлин В.Р., Селиванова О.В., Иванова О.А. Природный радиационный фон: Учебное пособие. – Воронеж, 2008. – 52 с.
- 2 Гигиенические нормативы «Санитарно-эпидемиологические требования к обеспечению радиационной безопасности» Утверждены приказом Министра национальной экономики Республики Казахстан от 27 февраля 2015 года № 155.
- 3 Экологический кодекс Республики Казахстан от 9 января 2007 года № 212.
- 4 О радиационной безопасности населения. Закон Республики Казахстан от 23 апреля 1998 года № 219.
- 5 Правила контроля и учета индивидуальных доз облучения, полученных гражданами при работе с источниками ионизирующего излучения, проведении медицинских рентгенорадиологических процедур, а также обусловленных

техногенным радиационным фоном. Приказ и.о. Министра национальной экономики Республики Казахстан от 27 марта 2015 года № 259.

6 Санитарные правила «Санитарно-эпидемиологические требования к обеспечению радиационной безопасности» Приказ и.о. Министра национальной экономики Республики Казахстан от 27 марта 2015 года № 261.

7 Юшков А.В., Дьячков В.В., Зарипова Ю.А., Медетов Б.Ж., Наурызбаева А.Ж. Исследование вариаций падающей на поверхность Земли плотности потока энергии от космического излучения // Известия НАН РК. Серия физико-математическая. – 2013. – № 2(288). – С. 138-141.

8 Oskomov V.V., Sedov A., Saduyev N.O., Kalikulov O., Kenzhina I., Tautaev E., Muhamedzhanov E., Dyachkov V.V., Utey Sh. Data collection system for a wide range of gas-discharge proportional neutron counters // Journal of Physics: IC-MSQUARE. – 2017. – Vol. 936 (12047). – P.1-5.

9 Dyachkov V.V., Zaripova Yu.A., Yushkov A.V., Shakirov A.L., Bigeldiyeva M.T., Dyussebayeva K.S., Abramov K.E. Periodic variations in time of atmospheric radioactive nanoparticles // Physical sciences and technology. – 2017. – Vol.4, No.1. – P. 20-26.

10 Дьячков В.В., Рахман А.Е., Зарипова Ю.А., Юшков А.В., Шакиров А.Л., Бигельдиева М.Т., Дюсебаева К.С., Абрамов К.Е. Изучение фрактальных свойств в топологии распределения бета-загрязненности региона Алматинской области // Сборник научных трудов V международной научной конференции. Алматы. – 2018. – С. 115-119.

### References

1 M.N. Levin, O.P. Negrobov, V.R. Gitlin, O.V. Selivanova, O.A. Ivanova, Natural radiation background. Textbook, (Voronezh, 2008), 52 p. (in Russ).

2 Hygienic standards “Sanitary-epidemiological requirements to ensure radiation safety” Approved by the order of the Minister of National Economy of the Republic of Kazakhstan dated February 27, 2015 No. 155. (in Russ).

3 Ecological Code of the Republic of Kazakhstan. The Code of the Republic of Kazakhstan dated January 9, 2007 No. 212. (in Russ).

4 On radiation safety of the population. Law of the Republic of Kazakhstan dated April 23, 1998 No. 219. (in Russ).

5 The rules for monitoring and recording individual exposure doses received by citizens when working with ionizing radiation sources, conducting medical X-ray and radiological procedures, and also caused by anthropogenic radiation background. Order of the Minister of the National Economy of the Republic of Kazakhstan No. 259 of March 27, 2015. (in Russ).

6 Sanitary rules “Sanitary and epidemiological requirements for ensuring radiation safety” Minister of National Economy of the Republic of Kazakhstan dated March 27, 2015, No. 261. (in Russ). (in Russ).

7 A.V. Yushkov, V.V. Dyachkov, Yu.A. Zaripova, B.Zh. Medetov, A.Zh. Naurzbaeva, Izvestiya NAN RK. A series of physics and mathematics, 2(288), 138-141 (2013). (in Russ).

8 V.V. Oskomov, A. Sedov, N.O. Saduyev, O. Kalikulov, I. Kenzhina, E. Tautaev, E. Muhamedzhanov, V.V. Dyachkov, and Sh. Utey, Journal of Physics: IC-MSQUARE, 936(12047), 1-5 (2017).

9 V.V. Dyachkov, Yu.A. Zaripova, A.V. Yushkov, A.L. Shakirov, M.T. Bigeldiyeva, K.S. Dyussebayeva, and K.E. Abramov, Physical sciences and technology, 4(1), 20-26 (2017).

10 V.V. Dyachkov, A.E. Rakhman, Yu.A. Zaripova, A.V. Yushkov, A.L. Shakirov, M.T. Bigeldiyeva, K.S. Dyussebayeva, and K.E. Abramov, Proc. of the V Intern. Scientific Conf. 2018. Almaty, 115-119 (2018). (in Russ).

**Бекбаев А.К.<sup>1,3\*</sup>, Азнабаев Д.Т.<sup>2,3</sup>, Коробов В.И.<sup>3</sup>,  
Кемелжанова С.Е.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Казахский национальный университет им. аль-Фараби,  
Казахстан, г. Алматы, \*e-mail: bekbaev-askhat@mail.ru

<sup>2</sup>Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева, Казахстан, г. Астана

<sup>3</sup>ОИЯИ, ЛТФ им. Н.Н. Боголюбова, Россия, г. Дубна

## **ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕРЕЛЯТИВИСТСКОГО ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА МОЛЕКУЛЯРНЫХ ИОНОВ ВОДОРОДА $H_2^+$ И $HD^+$**

Для решения фундаментальных проблем физики, химии, биологии и других наук, которые включают в себя множество повседневных практических задач, необходимо располагать методами исследования, позволяющими определять качественный и количественный составы вещества, его строение, свойства и другие параметры в широких пределах температур и давлений, в различных агрегатных состояниях, при малых и больших концентрациях и прочих физических условиях. Универсальным методом, который удовлетворяет всем этим условиям, является спектроскопия. Спектроскопия – раздел физики занимающийся исследованием строения вещества с помощью электромагнитного излучения, поглощенного, испущенного, рассеянного или отраженного объектом исследования. Электромагнитное излучение, разложенное по длинам волн или по энергии, образует спектр. Все современные учения о спектрах электромагнитного излучения базируются на квантовой теории, и тем самым молекулярная спектроскопия основывается на квантовых законах. В данной работе мы используем экспоненциальное разложение волновой функций с вариационным базисным набором типа  $\exp(-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_n)$  для систематического вычисления нерелятивистских энергии связанного состояния молекулярных ионов водорода  $H_2^+$ ,  $HD^+$ . Мы выполняем расчеты для состояний с общим орбитальным моментом  $L = 0-4$  и с набором колебательных квантовых чисел  $\nu = 0-10$ .

**Ключевые слова:** энергетический спектр, уравнение Шредингера.

Bekbaev A.K.<sup>1,3\*</sup>, Aznabayev D.T.<sup>2,3</sup>, Korobov V.I.<sup>3</sup> and Kemelzhanova S.E.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty, \*e-mail: bekbaev-askhat@mail.ru

<sup>2</sup>L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Astana

<sup>3</sup>JINR, BLTP, Russia, Dubna

### **Determination of the non-relativistic energy spectrum of molecular hydrogen ions $H_2^+$ and $HD^+$**

To solve the fundamental problems of physics, chemistry, biology and other sciences, which include many day-to-day practical tasks, it is necessary to have research methods that allow us determining the qualitative and quantitative composition of a substance, its structure, properties and other parameters in wide ranges of temperature and pressure, various aggregative states, at low and high concentrations and other physical conditions. A universal method that satisfies all these conditions is spectroscopy. Spectroscopy is the section of physics engaged in the study of the structure of matter using electromagnetic research, absorbed, emitted, scattered or reflected by the object of study. Electromagnetic radiation, decomposed by wavelength or energy, forms a spectrum. All modern studies on the spectra of electromagnetic radiation are based on quantum theory, and thus molecular spectroscopy is based on quantum laws. In this paper, we use the exponential expansion of the wave functions with the variational basis set type  $\exp(-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_n)$  for the systematic calculation of non-relativistic bound state energy hydrogen molecular ion  $H_2^+$  and  $HD^+$ . We perform calculations for the

state with the total orbital angular momentum  $L=0-4$  with a full set of vibrational quantum numbers  $\nu=0-10$ .

**Key words:** energy spectrum, Schrödinger equation.

Бекбаев А.К.<sup>1,3\*</sup>, Азнабаев Д.Т.<sup>2,3</sup>, Коробов В.И.<sup>3</sup>, Кемелжанова С.Е.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ., \*e-mail: bekbaev-askhat@mail.ru

<sup>2</sup>А.Н. Гумилев атындағы Евразиялық ұлттық университеті, Қазақстан, Астана қ.

<sup>3</sup>БЯЗИ, Н.Н. Боголюбов атындағы ТФЛ, Ресей, Дубна

### Сутегі молекулалық иондарының $H_2^+$ және $HD^+$ релятивистік емес энергиялық спектрін анықтау

Көптеген күнделікті практикалық тапсырмаларды қамтитын физика, химия, биология және басқа ғылымдардың іргелі мәселелерін шешу үшін температураның және қысымы кең ауқымдардағы заттардың, оның құрылымының, қасиеттерінің төмен және жоғары концентрацияларын, басқа да физикалық жағдайларда әртүрлі агрегаттық күйлер үшін параметрлердің сапалық және сандық құрамын анықтауға мүмкіндік беретін зерттеу әдістерін қолдану қажет. Барлық осы шарттарды қанағаттандыратын әмбебап әдіс спектроскопия әдісі болып табылады. Спектроскопия әдісі физика саласын зертеу барысындағы электромагнитті зерттеу әдістерін қолданып, зерттеу нысанымен зерттелетін, сіңірілетін, шығарылатын, шашыратылған немесе көрінетін заттардың құрылымын зерттеумен айналысатын негізгі әдістердің бірі болып табылады. Толқын ұзындығы немесе энергиясы арқылы ыдырайтын электромагниттік сәуленің спектрін құрайды. Электромагниттік сәулелену спектрлеріндегі барлық қазіргі заманғы ілімдер кванттық теорияға негізделген, сондықтан молекулалық спектроскопия кванттық заңдарға негізделген. Біз бұл жұмыста  $H_2^+$ ,  $HD^+$  сутегі молекулалық иондарының релятивистік емес энергияның байланыс күйінің жүйелілігін есептеу үшін  $\exp(-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_n)$  базистік түрдегі толқындық функцияны пайдаланамыз.  $\nu=0-10$  тербеблмелі кванттық сандардың толық жиыны бар және  $L=0-4$  жалпы орбиталдық моменттері бар күйлер үшін есептеулер жүргіземіз.

**Түйін сөздер:** энергиялық спектр, Шредингер теңдеуі.

## Введение

Молекулярные спектры ионов водорода, описываются более сложным образом, нежели двухатомные. Наряду с движением электронов существенную роль играют периодические колебания относительного расположения ядер – колебательное движение молекулы и периодические изменения ориентации молекулы как целого в пространстве – вращательное движение молекулы. Таким образом, в молекуле существует три вида движений – электронное, колебательное и вращательное. Это приводит к тому, что спектры молекул значительно сложнее спектров атомов и как правило, имеют очень характерный вид.

В данной работе рассматривается квантовая задача трех тел с кулоновским взаимодействием, которая является одной из наиболее известных неинтегрируемых задач в квантовой механике. Задача на связанные состояния для системы трех частиц допускает сколь угодно точные численные решения на современных вычислительных машинах.

Основной задачей является вычисление нерелятивистских уровней энергии в квантовой

системе трех частиц, в частности рассматриваем молекулярные ионы водорода  $H_2^+$  и  $HD^+$ .

Предложенные эксперименты по лазерной спектроскопии [1,2] для высокоточных измерений колебательного спектра молекулярных ионов водорода  $H_2^+$  и  $HD^+$ , представляют метрологический интерес и нацелены на высокую точность, для того, чтобы улучшить современную точность отношения масс электронов к протону [3], неопределенность спектроскопических данных, а также теоретические расчеты спектров для сравнения. Чтобы удовлетворить этим строгим требованиям, теоретические расчеты должны достичь, по крайней мере, уровня 10 кГц (или  $10^{-11}$  в атомных единицах).

### Вариационная волновая функция. Экспоненциальное разложение.

Экспоненциальное разложение для  $S$  – состояний имеет вид:

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}, \quad (1)$$

где параметры в экспоненте выбираются тем или иным образом. В ранних работах [4], исполь-

зовавших разложение (1), полученное представление связывали с дискретизацией интегрального представления волновой функции

$$\psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) = \int \varphi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A; \alpha) f(\alpha) d\alpha, \quad (2)$$

предложенного еще Гриффином и Уиллером [5] в 1957 году. При этом параметры  $\alpha_n$ ,  $\beta_n$  и  $\gamma_n$  выбирались в соответствии с различными квадратурными формулами интегрирования (2). Систематическое исследование разложения (1) с использованием параметров, генерируемых с помощью псевдослучайных чисел, было дано в [6]. В предлагаемом подходе нелинейные параметры из уравнения (1) генерируются с помощью следующих простых формул:

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\alpha} \right] (A_2 - A_1) + A_1 \right], \\ \beta_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\beta} \right] (B_2 - B_1) + B_1 \right], \\ \gamma_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\gamma} \right] (C_2 - C_1) + C_1 \right], \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь  $[x]$  обозначает дробную часть  $x$ , а  $p_\alpha, p_\beta$  и  $p_\gamma$  – некоторые простые числа. Преимущество этих простых генераторов псевдослучайных чисел состоит в воспроизводимости результатов вариационных вычислений. Скорость сходимости экспоненциального разложения с псевдослучайной стратегией выбора нелинейных параметров (3) необычайно высока на наборах базисных функций умеренных размерностей (до 100–200 пробных функций). К недостаткам метода следует отнести быстрое вырождение базиса, что приводит к потере устойчивости вычислений в арифметике двойной точности уже при размерностях базиса  $N \sim 200$ .

Другой существенной особенностью метода является медленная сходимость разложения для систем с двумя тяжелыми ядрами, такими как  $H_2^+$  и  $HD^+$ . Подобное поведение можно легко объяснить отсутствием осцилляций у экспоненты, описывающей взаимное движение тяжелых ядер, в то время как осцилляторное поведение характерно для колебательных степеней свободы молекулярных систем. Однако рецепт, позволяющий избавиться от этого недостатка, очень прост, достаточно ввести вместо вещественных экспонент в (1) комплексные и перейти к базису

состоящему из вещественных и мнимых частей исходного базиса:

$$\begin{aligned} \psi(r_1, r_2, r_{12}) &= \sum_{n=1}^N \{ C_n \operatorname{Re}[\exp(-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma r_{12})] + \\ &+ D_n \operatorname{Im}[\exp(-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma r_{12})] \}. \end{aligned} \quad (4)$$

Данный рецепт был предложен Ребане и Юсуповым [7] (в варианте для одной комплексной базисной функции) и независимо Коробовым В.И. [8], а также в несколько менее эффективной форме Фроловым и Смитом [9]. Для построения вариационной функции для молекулярных систем при полном орбитальном моменте не равном нулю, удобно использовать разложение по биполярным гармоникам,

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l_1+l_2=L} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}), \quad (5)$$

аналогичное обобщенному хиллераасовскому разложению с произвольным полным угловым моментом системы  $L$

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l_1+l_2=L} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \left[ e^{-\alpha r_1 - \beta r_2 - \gamma r_{12}} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{lmn} r_1^l r_2^m r_{12}^n \right], \quad (6)$$

которое связывается с молекулярным разложением

$$\begin{aligned} \psi_M^{L\pi}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \sum_{m=\mu(\pi)}^L \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi} * (\Phi, \Theta, \varphi) F_m^{L\pi}(R, r, \theta); \\ \mu(\lambda) &= \begin{cases} 0, & \text{для } \pi = (-1)^L, \\ 1, & \text{для } \pi = (-1)^{L+1}. \end{cases} \end{aligned} \quad (7)$$

с помощью следующего соотношения:

$$\begin{aligned} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= \sqrt{2\pi} \sum_{m=\varepsilon(\pi)}^{l_2} T_{l_1 l_2}^{L\pi m} \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi} * (\Phi, \Theta, \varphi) Y_{l_2 m}(\theta, 0), \\ \varepsilon(\pi) &= L - L = l_1 + l_2 - L, \end{aligned} \quad (8)$$

где коэффициенты  $T_{l_1 l_2}^{L\pi m}$  выражаются через коэффициенты Клебша-Гордана:

$$T_{l_1 l_2}^{L\pi m} = \left[ \left( \frac{1 + \pi(-1)^{l_1+l_2}}{1 + \delta_{0m}} \right) \left( \frac{2l_1 + 1}{2L + 1} \right) \right]^{1/2} \langle l_1 0 l_2 m | L m \rangle. \quad (9)$$

При этом геометрия выбирается так, что  $R = r_1$ , а  $r = r_2$ . В этом случае разложение по угловым переменным индексируется параметром  $l_2$  – угловым моментом легкой частицы и быстро сходится по  $l_2$ , так как подпространства

$$\mathcal{H}_m = \sum_{m=\varepsilon(\pi)}^{m_{\max}} \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi}(\Phi, \Theta, \varphi) F_m^{L\pi}(R, r, \theta), \quad (10)$$

и

$$\overline{\mathcal{H}}_m = \sum_{l_2=\varepsilon(\pi)}^{m_{\max}} R^{l_1} r^{l_2} \{Y_{l_1} \otimes Y_{l_2}\}_{LM} G_{l_1 l_2}^{L\pi}(R, r, \theta) \quad (11)$$

совпадают.

Для удобства выпишем экспоненциальное вариационное разложение в полном виде с учетом угловой зависимости волновой функции, описывающей вращательные степени свободы:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{l_1+l_2=\mathcal{L}} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}), \\ G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}) &= \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}, \end{aligned} \quad (12)$$

где  $\mathcal{L} = L$ , или  $L + 1$ , в зависимости от пространственной четности состояния, а комплексные параметры в экспоненте генерируются псевдослучайным образом (3).

Замедление сходимости наблюдается в молекулярных расчетах, особенно для состояний с большим вибрационным квантовым числом, это объясняется тем, что частота осцилляций (волновое число) зависит от  $R$  – расстояния между ядрами в системе и его изменение обусловлено спадом потенциала эффективного взаимодействия между тяжелыми частицами. В то же время, оптимизируя вариационный интервал для нелинейного параметра, который определяет волновое число решения в наиболее существенной для энергии области, мы получаем неэффективное приближение в других областях по  $R$ . Чтобы исправить создавшееся положение необходимо строить многослойное вариационное разложение, состоящее из нескольких неза-

висимых наборов базисных функций, оптимальные вариационные нелинейные параметры для которых ищутся независимым образом. Таким образом, каждый набор базисных функций, определяет оптимальное приближение в определенной области координат системы. Подобная стратегия приводит к тому, что экспоненциальное разложение становится наиболее эффективным и универсальным методом решения для связанных состояний в квантовой задаче трех тел с кулоновским взаимодействием. Возможности этого метода были продемонстрированы в [10-11].

Чтобы решить проблему численной неустойчивости расчетов при больших значениях  $N$  первоначально использовался модуль программ «multiprecision» разработанный Бейли [12] для работы с Фортраном-90. Этот пакет позволяет производить расчеты в арифметике с любой наперед заданной точностью. Позднее Коробовым В.И. были разработаны модули программ шестерной и восьмерной точности (соответственно, 48 и 64 десятичных цифр), которые помогли ускорить время счета в пять и более раз по сравнению с пакетом «multiprecision». Важной особенностью нового стандарта Фортрана 90 является возможность использовать модули расширенной точности без существенного изменения исходных программ.

Далее решаем уравнение Шредингера для трехтельной кулоновской системы, используя вариационный подход, основанный на экспоненциальном разложении с произвольно выбранными показателями. Этот подход был обсужден в работах [13-15]. Подробности и конкретная стратегия выбора вариационных нелинейных параметров и базисной структуры, которые были использованы можно найти в [16].

В рамках нашего подхода рассмотрена трехтельная кулоновская система, в которой определены энергетические спектры и волновая функция (ВФ) с учетом релятивистских поправок. Волновую функцию для состояния с общим орбитальным моментом  $L$  и с пространственной четностью  $\pi = (-1)^L$  запишем следующим образом:

$$\begin{aligned} \psi_{LM}^{\pi}(\mathbf{R}, \mathbf{r}_1) &= \sum_{l_1+l_2=L} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{r}}_1) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(R, r_1, r_2) \\ G_{l_1 l_2}^{L\pi}(R, r_1, r_2) &= \sum_{n=1}^N \{C_n \operatorname{Re}[e^{-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_2}] + D_n \operatorname{Im}[e^{-\alpha_n R - \beta_n r_1 - \gamma_n r_2}]\} \end{aligned} \quad (13)$$

где комплексные экспоненты,  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ , генерируются псевдослучайным образом.

Когда показатели  $\alpha_n$ ,  $\beta_n$  и  $\gamma_n$  являются реальными, метод обнаруживает медленную сходимость для кулоновских систем молекулярного типа. Таким образом, использование комплексных показателей позволяет воспроизвести осцилляторное поведение колебательной

части волновой функции и улучшить сходимость [17-19].

Значения нерелятивистских энергий для ро-вибрационных состояний представлены в таблицах I и II. Точность расчетов составляет  $10^{-15}$ –  $10^{-21}$  а.е.м. которая достигается при использовании базового набора функций  $N = 10000$ - $24000$ .

**Таблица 1** –  $H_2^+$ . Нерелятивистские энергии ро-вибрационных состояний с общим орбитальным моментом  $L = 0-4$  и вибрационным квантовым числом  $\nu = 0 - 10$ .  $N$  – число базисных функций

$\nu$	$N$	$E(L=0)$	$N$	$E(L=1)$
0	10000	-0.597139063081376670963	12000	-0.59687373878687954923
1	10000	-0.587155679101444713781	10000	-0.586904320924614380
2	10000	-0.5777519044232167853	10000	-0.5775140340657336467
3	10000	-0.5689084987415003994	10000	-0.568683708270965639
4	16000	-0.560609220862442689	16000	-0.5603971714131924453
5	16000	-0.55284074991111841	16000	-0.5526411715648436
6	20000	-0.545592651009840162	20000	-0.54540534397317974
7	24000	-0.538857386984525910	24000	-0.53868222425807562
8	24000	-0.532630379374145566	24000	-0.53246731121551050
9	24000	-0.526910124034590286	24000	-0.5267591846776329
10	24000	-0.52169836903255114	24000	-0.52155968637179901
$\nu$	$N$	$E(L=2)$	$N$	$E(L=3)$
0	10000	-0.596345205491918999	10000	-0.59555763898337169218
1	10000	-0.586403631534449060	10000	-0.585657611883906690
2	10000	-0.577040237171615740	10000	-0.576334350228669387
3	10000	-0.568235992982634681	10000	-0.567569034844973164
4	16000	-0.559974864833213010	16000	-0.559345838241807626
5	16000	-0.552243738633085362	16000	-0.551651852949522041
6	20000	-0.54503238992232136	20000	-0.54447706506636723
7	24000	-0.53833350007876060	24000	-0.5378143750491274
8	24000	-0.53214272275155271	24000	-0.53165966969948405
9	24000	-0.526458806300162	24000	-0.5260119516427957
10	24000	-0.5212837806920813	24000	-0.5208735355638968
$\nu$	$N$	$E(L=4)$		
0	10000	-0.5945171692427256300		
1	10000	-0.584672134235802976		
2	10000	-0.57540200330847469		
3	10000	-0.56668823664171939		
4	16000	-0.558515281639920927		
5	16000	-0.55087050609878926		
6	20000	-0.5437441771166975		
7	24000	-0.5371294881293674		
8	24000	-0.53102263850938890		
9	24000	-0.5254229727658310		

**Таблица 2** –  $HD^+$ . Нерелятивистские энергии ро-вибрационных состояний с общим орбитальным моментом  $L = 0 - 4$  и вибрационным квантовым числом  $\nu = 0 - 10$ .  $N$  – число базисных функций

$\nu$	$N$	$E(L=0)$	$N$	$E(L=1)$
0	10000	-0.59789796861075746	12000	-0.59769812819407502
1	10000	-0.58918182956159831911	10000	-0.588991111996806790
2	10000	-0.5809037002256222635	10000	-0.58072182812830538

3	10000	-0.573050546561443788	10000	-0.57287727710390243
4	12000	-0.5656110420884317035	16000	-0.565446166289299394
5	18000	-0.558575520838957147	16000	-0.5584188632723593
6	20000	-0.55193594897172246	20000	-0.5517873679235169
7	20000	-0.545685915309083405	24000	-0.5455453034256591
8	24000	-0.539820641562965801	24000	-0.5396879270613431
9	24000	-0.534337013579132556	24000	-0.534212162118581
10	24000	-0.52923363558443106	24000	-0.529116652944043
$\nu$	N	E(L=2)	N	E(L=3)
0	10000	-0.59729964335392085	10000	-0.59670488276444281
1	10000	-0.5886108293948123556	10000	-0.588043264168244666
2	10000	-0.58035919520749483	10000	-0.579818002035836003
3	10000	-0.57253181033588176	10000	-0.57201626924275329
4	16000	-0.565117449775665937	16000	-0.564626942074290959
5	16000	-0.558106548187500297	16000	-0.557640555706619105
6	20000	-0.55149117285516618	20000	-0.55104927852073217
7	24000	-0.54526501570594894	24000	-0.54484690562225467
8	24000	-0.539423405228383457	24000	-0.53902887247515705
9	24000	-0.53396333971274348	24000	-0.53359229017406478
10	24000	-0.52888354393351798	24000	-0.5285360046150233
$\nu$	N	E(L=4)		
0	10000	-0.595917342215897764		
1	10000	-0.587291784380128168		
2	10000	-0.579101495573924028		
3	10000	-0.57133378605666977		
4	16000	-0.563977666880251251		
5	16000	-0.557023807071968768		
6	20000	-0.5504645097737052		
7	24000	-0.54429370778720762		
8	24000	-0.53850697953450243		
9	24000	-0.5331015870965524		
10	24000	-0.52807653878734155		

## Заключение

Был проведен анализ основных подходов к построению вариационного разложения решений для молекулярных ионов водорода  $H_2^+$  и  $HD^+$ , как для основного состояния, так и для состояний с ненулевым орбитальным угловым моментом. Представлены расчеты нерелятивистских уровней энергий для состояний с угловыми моментами  $L = 0 - 4$  и колебательными квантовыми числами  $\nu = 0 - 10$ . Также нами были проведены исследования сходимости, в зависимости от числа пробных функций, что позволило утверждать, что точность расчетов

достигает  $10^{-15} - 10^{-21}$  а.е.м. Результаты показывают, что точность данных расчетов превышает точности предыдущих работ [20], это позволяет сказать, что последующие расчеты, в которых, будут учтены выше описанные нерелятивистские энергии, дадут более точные теоретические данные.

## Благодарности

Данная статья написана при поддержке грантового финансирования Министерства образования и науки Республики Казахстан ИРН № AP05132978.

## Литература

- 1 Grémaud B., Delande D., and Billy N. Highly accurate calculation of the energy levels of the  $H_2^+$  molecular ion // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. -1998. – Vol.31, No3. – P.383.
- 2 Schiller S. and Lämmerzahl C. Molecular dynamics simulation of sympathetic crystallization of molecular ions // Phys. Rev. A – 2003. – Vol.68, Iss.5. – P.053406.
- 3 Farnham D.L., Van Dyck R.S., and Schwinberg P.B. Determination of the electron's atomic mass and the proton/electron mass ratio via Penning trap mass spectroscopy // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol.75. – P.3598-3601.
- 4 Rosenthal C.M. The reduction of the multi-dimensional schrödinger equation to a one-dimensional integral equation // Chem. Phys. Lett. -1971. –Vol.10. – P.381-386.



- 5 Griffin J.J. and Wheeler J.A. Collective Motions in Nuclei by the Method of Generator Coordinates // *Phys. Rev.* -1957. – Vol.108. – P.311.
- 6 Thakkar A.J. and Smith V.H. Compact and accurate integral-transform wave functions. I. The 11S state of the helium-like ions from H<sup>-</sup> through Mg10<sup>+</sup> // *Phys. Rev. A* – 1977. – Vol.15. – P.1.
- 7 Rebane T.K., Yusupov O.N. Complex exponential basis wave functions in the Coulomb three-body problem // *JETP.* – 1990. – Vol. 71, No. 6. – P.1050.
- 8 Korobov V.I., Bakalov D. and Monkhorst H.J. Variational expansion for the antiprotonic helium atoms // *Phys. Rev. A.* – 1999. – Vol.59. – P.R919.
- 9 Frolov A.M. and Smith V.H. Jr. Universal variational expansion for three-body systems // *J. Phys. B.* – 1995. – Vol.28. – P.L449.
- 10 Korobov V.I. Coulomb three-body bound-state problem: Variational calculations of nonrelativistic energies // *Phys. Rev. A.* -2000. – Vol.61. – P.064503.
- 11 Korobov V. Nonrelativistic ionization energy for the helium ground state // *Phys. Rev. A.* -2 002. – Vol.66. – P.024501.
- 12 Bailey D.H. Algorithm 719: Multiprecision translation and execution of FORTRAN programs // *ACM Trans. Math. Software.* – 1993. – Vol.19. – P.288.
- 13 Schiller S. and Korobov V. Tests of time independence of the electron and nuclear masses with ultracold molecules // *Phys. Rev. A* – 2005. – Vol.71. – P.032505.
- 14 Korobov V.I. Bethe logarithm for the hydrogen molecular ion HD<sup>+</sup> // *Phys. Rev. A* – 2004. – Vol.70. – P.012505.
- 15 Korobov V.I. Bethe logarithm for the hydrogen molecular ion H<sub>2</sub><sup>+</sup> // *Phys. Rev. A* – 2006. – Vol.73. – P.024502.
- 16 Cassar M.M. and Drake G.W.F. High precision variational calculations for H<sub>2</sub><sup>+</sup> // *J. Phys. B.* – 2004. – Vol.37. – P.2485.
- 17 Korobov V.I. Coulomb three-body bound-state problem: Variational calculations of nonrelativistic energies // *Phys. Rev. A.* – 2000. – Vol.61. – P. 064503.
- 18 Frolov A.M. and Smith V. H. Jr. Universal variational expansion for three-body systems // *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* – 1995. – Vol.28. – P. L449.
- 19 Korobov V.I., Bakalov D., and Monkhorst H.J. Variational expansion for antiprotonic helium atoms // *Phys. Rev. A.* – 1999. – Vol.59.-P.R919.
- 20 Korobov V.I. Leading-order relativistic and radiative corrections to the rovibrational spectrum of H<sub>2</sub><sup>+</sup> and HD<sup>+</sup> molecular ions // *Phys. Rev. A.* – 2006. – Vol.74. – P.052506.

#### References

- 1 B. Grémaud, D. Delande, and N. Billy, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 31, 383 (1998).
- 2 S. Schiller and C. Lämmerzahl, *Phys. Rev. A* 68, 053406 (2003).
- 3 D.L. Farnham, R.S. Van Dyck, and P. B. Schwinberg, *Phys. Rev. Lett.* 75, 3598-3601 (1995).
- 4 C.M. Rosenthal, *Chem. Phys. Lett.* 10, 381-386 (1971).
- 5 J.J. Griffin and J.A. Wheeler, *Phys. Rev.* 108, 311 (1957).
- 6 A.J. Thakkar and V.H. Smith, *Phys. Rev. A* 15, 1 (1977).
- 7 T.K. Rebane and O.N. Yusupov, *JETP*, 71, 1050 (1990).
- 8 V.I. Korobov, D. Bakalov and H.J. Monkhorst, *Phys. Rev. A* 59, R919 (1999).
- 9 A.M. Frolov and V.H. Smith, Jr., *J. Phys. B* 28, L449 (1995).
- 10 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 61 064503 (2000).
- 11 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 66, 024501 (2002).
- 12 D.H. Bailey, *ACM Trans. Math. Software* 19, 288 (1993).
- 13 S. Schiller and V. Korobov, *Phys. Rev. A* 71, 032505 (2005).
- 14 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 70, 012505 (2000).
- 15 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 73, 024502 (2006).
- 16 M.M. Cassar and G.W.F. Drake, *J. Phys. B* 37, 2485 (2004).
- 17 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 61, 064503 (2000).
- 18 A.M. Frolov and V. H. Smith, Jr., *J. Phys. B: At. Mol. Opt.*, 28, L449 (1995).
- 19 V.I. Korobov, D. Bakalov, and H.J. Monkhorst, *Phys. Rev. A* 59, R919 (1999).
- 20 V.I. Korobov, *Phys. Rev. A* 74, 052506 (2006).



2-бөлім  
**ПЛАЗМА ФИЗИКАСЫ**

---

Section 2  
**PLASMA PHYSICS**

---

Раздел 2  
**ФИЗИКА ПЛАЗМЫ**

**Архипов Ю.В.<sup>1</sup>, Аскарулы А.<sup>1</sup>, Ашикбаева А.Б.<sup>1</sup>, Давлетов А.Е.<sup>1</sup>,  
Дубовцев Д.Ю.<sup>1</sup>, Сантыбаев Х.<sup>1</sup>, Ткаченко И.М.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Казахский национальный университет имени аль-Фараби,  
НИИ Экспериментальной и теоретической физики, Казахстан, г. Алматы

<sup>2</sup>Институт чистой и прикладной математики  
Валенсийского политехнического университета, Испания, г. Валенсия,  
\*e-mail: yarkhipov@yahoo.ca

## **АНАЛИЗ МЕТОДОВ РАСЧЕТА СТАТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛОТНЫХ КУЛОНОВСКИХ СИСТЕМ**

В данной работе был проведен анализ различных методов (HNC, MHNC, VMHNC, Перкуса-Йевика и аналитических моделей), расчета статических характеристик. Были получены структурные характеристики однокомпонентной плазмы в широком диапазоне параметра связи различными современными методами (HNC, MHNC, VMHNC, Перкуса-Йевика и аналитических моделей). Все эти методы были проанализированы на выполнение фундаментального математического неравенства Коши-Шварца. В результате: методы HNC с эмпирической формулой функции мостиковой поправки и один из методов получения структурного фактора на основе фитинговой формулы не удовлетворяют неравенству Коши-Шварца. Другие вышеперечисленные методы расчета структурных характеристик удовлетворяют условиям вышеперечисленного неравенства. Для проведения анализа была получена функциональная зависимость, выражающая неравенство Коши-Шварца. Данная зависимость включает в себя частотные моменты, которые определяются в рамках метода моментов. Для удовлетворения неравенству, эта зависимость должна быть строго положительна. Для каждого рассмотренного метода получения статических структурных характеристик, была построена и проанализирована эта зависимость. В результате чего, было установлено что ряд методов не удовлетворяет неравенству Коши-Шварца.

**Ключевые слова:** однокомпонентная плазма, кулоновская система, метод гиперцепного приближения, интегральное уравнение Орнштейна-Цернике, неравенство Коши-Шварца.

Arkhipov Yu.V.<sup>1</sup>, Askaruly A.<sup>1</sup>, Ashikbayeva A.B.<sup>1</sup>, Davletov A.E.<sup>1</sup>,  
Dubovtsev D.Y.<sup>1</sup>, Santybayev Kh.<sup>1</sup>, Tkachenko I.M.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Al-Farabi Kazakh National University, IETP, Faculty of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty

<sup>2</sup>Departamento de Matemática Aplicada, Universidad Politécnica de Valencia, Spain, Valencia,  
\*e-mail: yarkhipov@yahoo.ca

### **Analysis of methods for calculating the static characteristics of dense Coulomb systems**

In this paper, various methods for calculating static characteristics of plasma, such as HNC, MHNC, VMHNC, Percus-Yevik and analytical models were analyzed to satisfy a mathematical condition. Structural characteristics of a one-component plasma were reconstructed in a wide range of coupling parameters within the most requested various modern methods (HNC, MHNC, VMHNC, Percus-Yevik, and analytical models). All these methods were analyzed to fulfill the fundamental Cauchy – Schwartz mathematical inequality. As a result a HNC method with the empirical expression of the bridge function and one of the recent methods for obtaining a structural factor based on a parameterized formula does not satisfy the inequality. The other methods for calculating static characteristics listed above beside the stated ones satisfy the condition. For the general analysis of a method, functional dependence was

obtained expressing the Cauchy-Schwartz inequality. This dependence includes the frequency moments, which are defined within the framework of the method of moments. To satisfy the inequality, this relationship must be strictly positive. For each considered method of obtaining static structural characteristics, this relationship was calculated and analyzed. As a result, it was found that a number of methods do not satisfy the Cauchy-Schwartz inequality.

**Key words:** one-component plasma, Coulomb system, hyper-netted chain approximation, Ornstein-Zernike integral equation, Cauchy-Schwarz inequality.

Архипов Ю.В.<sup>1</sup>, Асқарұлы Ә.<sup>1</sup>, Ашықбаева Ә.Б.<sup>1</sup>, Давлетов А.Е.<sup>1</sup>,  
Дубовцев Д.Ю.<sup>1</sup>, Сантыбаев Х.<sup>1</sup>, Ткаченко И.М.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті,  
Эксперименттік және теориялық физика ҒЗИ, Қазақстан, Алматы қ.

<sup>2</sup>Валенсия Политехникалық Университетінің таза және  
қолданбалы математика институты, Испания, Валенсия қ.,  
e-mail: yarkhipov@yahoo.ca

### Тығыз кулондық жүйелердің статикалық сипаттамаларын есептеу әдістерін талдау

Осы мақалада статикалық сипаттамаларды есептеу барысында әртүрлі әдістердің (НСС, МНСС, VMНСС, Перкус-Йевик және аналитикалық модельдер) талдауы жүргізілді. Әртүрлі заманауи әдістер арқылы (НСС, МНСС, VMНСС, Перкус-Йевик және аналитикалық модельдер) кең ауқымда байланыс параметрімен бір компонентті плазманың құрылымдық сипаттамалары алынды. Барлық осы әдістер фундаменталды математикалық Коши-Шварц теңсіздігін орындау үшін талданды. Нәтижесінде көпіді түзету функциясының эмперикалық формуласы бар НСС әдістері және фитингтік формулалар негізіндегі құрылымдық факторларды алу тәсілдерінің бірі Коши-Шварц теңсіздігін қанағаттандырмайды. Жоғарыда аталған құрылымдық сипаттамаларды есептеудің басқа әдістері жоғарыда көрсетілген теңсіздікті қамтамасыз етеді. Талдау жұмысын жүргізу үшін Коши-Шварц теңсіздігін сипаттайтын функционалдық тәуелділік алынды. Бұл тәуелділік әдістер аумағында анықталатын жиіліктерді қамтиды. Теңсіздікті қанағаттандыру үшін бұл қатынас қатаң түрде оң болуы керек. Статикалық-құрылымдық сипаттамаларды алатын әрбір қарастырылған әдістер үшін бұл тәуелділік құрылды және талданды. Нәтижесінде бірқатар әдістер Коши-Шварц теңсіздігін қанағаттандырмайтынғы анықталды.

**Түйін сөздер:** бір компонентті плазма, кулондық жүйе, гипертізбекті жуықтау әдісі, Орнштейн-Церниктің интегралдық теңдеуі, Коши-Шварц теңсіздігі.

### Введение

В связи с интенсивным развитием техники и энергоемких технологий, в последние десятилетия, наряду с расширением возможностей традиционных источников развиваются различные альтернативные источники энергии. Одним из таких направлений альтернативной энергетики является термоядерная энергетика [1].

В настоящее время существует два известных типа установок, в основе которых лежит получение термоядерной энергии это – магнитное удержание плазмы и инерциальный синтез. Учеными различных стран построено большое количество установок для изучения реализации условий развития термоядерного синтеза. Установки с магнитным удержанием – это, в основном, ТОКАМАКИ, работа устройств инерционного синтеза основана на взаимодействии интенсивных лазерных пучков, или потоков ионов с термоядерной мишенью [1].

Исходя из трудности практической реализации реакции управляемого термоядерного синтеза, учеными было разработано большое количество теоретических моделей, которые позволяют описывать физические процессы, происходящие внутри термоядерных установок [2].

Среди широкого многообразия существуют три основных метода исследования свойств кулоновских систем. К ним относятся математическое моделирование – метод молекулярной динамики (МД), позволяющий рассчитывать как динамические, так и статические характеристики и метод Монте-Карло (МС) – статические характеристики [3-4]. Кроме того, существует аналитический подход, который предполагает решение интегральных уравнений Орнштейна-Цернике и Перкуса-Йевика [5]. Метод гиперцепного приближения позволяет численно решать эти уравнения. Гиперцепное приближение (ГЦП) позволяет рассчитать структурные характеристики плазмы: радиальную функцию

распределения, статический структурный фактор. Радиальная функция распределения применяется для вычисления термодинамических характеристик – давления и внутренней энергии.

Быстро развивающийся в последнее время, сравнительно новый метод моментов позволяет определять динамические характеристики плотной плазмы, например, динамический структурный фактор, по известным статическим. То есть точный расчет статических структурных факторов и корреляционных функций позволяет верно вычислять динамические структурные факторы, дисперсию и диссипацию волн в плазме [6-9].

Целью настоящей заметки является анализ известных методов определения статических структурных факторов HNC, MHNC, VMHNC, Перкуса-Йевики и аналитических моделей с точки зрения выполнения известных математических соотношений.

### Параметры плазмы

В данной работе рассматривается неидеальная, однокомпонентная, полностью ионизованная, невырожденная плазма, характеризующаяся безразмерным параметром связи  $\Gamma$ :

$$\Gamma = \frac{e^2}{ak_B T}, \quad (1)$$

где  $e$  – заряд электрона,  $a = \sqrt[3]{3/4\pi n}$  – радиус Вигнера–Зейца,  $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$ ,  $n$  – температура и плотность.

В качестве потенциала межчастичного потенциала взаимодействия использован потенциал Кулона

$$\varphi(r) = \frac{e^2}{r}. \quad (2)$$

### Метод гиперцепного приближения

Статические корреляционные функции, в частности, можно вычислить с помощью интегрального уравнения Орнштейна–Цернике (ОЦ) в гиперцепном приближении [5]. Из формализма функционала плотности известно, что полная корреляционная функция [7], которая определяется через радиальную функцию распределения  $g_{ab}(r)$ ,

$$h_{ab}(r) = g_{ab}(r) - 1, \quad (3)$$

связана с прямой корреляционной функцией  $c_{ab}(r)$  с помощью соотношения ОЦ:

$$h_{ab}(r) = c_{ab}(r) + \sum_d n_d \int d\mathbf{r}' h_{ad}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) c_{db}(r'), \quad (4)$$

где  $n_d$  – концентрация частиц сорта  $d$ .

Гиперцепное приближение определяет радиальную функцию распределения в следующем виде

$$g_{ab}(r) = \exp[-\beta\varphi_{ab}(r) + h_{ab}(r) - c_{ab}(r)], \quad (5)$$

где  $\beta = 1/k_B T$ , а  $\varphi_{ab}(r)$  – потенциал взаимодействия частиц сорта  $a$  и  $b$ .

Уравнения (4)–(5) являются замкнутой системой уравнений и могут быть рассчитаны численно до необходимой точности. Численное решение уравнения ОЦ в гиперцепном приближении можно получить при помощи прямого/обратного преобразования Фурье.

Основная численная схема метода может быть записана в следующем виде:

$$\tilde{N}_s = \frac{\tilde{C}}{(1-\rho\tilde{C})} - C_s$$

$$g(r) = \exp[N_s(r) - u_s(r)], \quad (6)$$

$$C_s(r) = g(r) - 1 - N_s(r)$$

где

$$u_s(r) = u(r) - u_l(r)$$

$$C_s(r) = C(r) + u_l(r), \quad (7)$$

$$N_s(r) = N(r) - u_l(r)$$

уравнения, благодаря которым основные уравнения (6) в итерационном блоке сходятся быстрее и таким образом позволяет сократить время и количество итераций. При этом  $N(r)$  – представляет собой сумму узловых диаграмм:

$$N(r) = h(r) - C(r), \quad (8)$$

а  $\rho$  – числовая плотность, значками “ $\tilde{\phantom{x}}$ ” над величинами обозначены Фурье–образы этих величин.

При правильном подборе функции  $u_l(r)$ , данная система уравнений (6–7) решается численно путем итераций до необходимой точности. Трудность данного метода заключается в получении сходящегося решения по мере возрастания  $\Gamma$ . Таким образом, для более устойчивой итерационной схемы, функция  $C_s(r)$  должна обеспечивать сходимость при переходе в Фурье–пространство, а ее начальные значения по мере возрастания определяются на основе значений при малых параметрах связи с помощью линейной экстраполяции. Для получения более точного решения, достаточно выполнения неравенства

$$C_{rms} \equiv \left\{ \int |C^{(out)}(r) - C^{(in)}(r)|^2 dr \right\}^{1/2} < 10^{-10} \Gamma. \quad (9)$$

Для улучшения результатов решения уравнения ОЦ (4–5) применяют мостиковые поправки, т.е., более точное выражение для радиальной функции распределения выглядит следующим образом:

$$g_{\alpha\beta}(r) = \exp[-\beta v_{\alpha\beta}(r) + N_{\alpha\beta}(r) + B_{\alpha\beta}(r)], \quad (10)$$

где  $B_{\alpha\beta}(r)$  – сумма мостиковых диаграмм.

Тогда для решения уравнения нужно переписать уравнения (6), связывающие корреляционные функции с учетом мостиковых поправок в следующем виде:

$$\begin{aligned} \tilde{N}_s &= \frac{\tilde{C}}{(1 - \rho\tilde{C})} - \tilde{C} \\ g(r) &= \exp[B(r) + N_s(r) - u_s(r)], \quad (11) \\ C_s(r) &= g(r) - 1 - N_s(r) \end{aligned}$$

Радиальная функция распределения имеет следующий вид

$$g(r) = \exp[-u(r) + N(r) + B(r)], \quad (12)$$

где  $B(r)$  – сумма мостиковых диаграмм. Согласно [5], эмпирическая формула для функции мостиковой поправки в приближении Дебая-Хюккеля может быть представлена в виде

$$B(r) = -\lambda\Gamma / r, \quad (13)$$

где параметр  $\lambda = 0.6 \operatorname{erf}(0.024\Gamma)$  имеет малые значения при малых  $\Gamma$ .

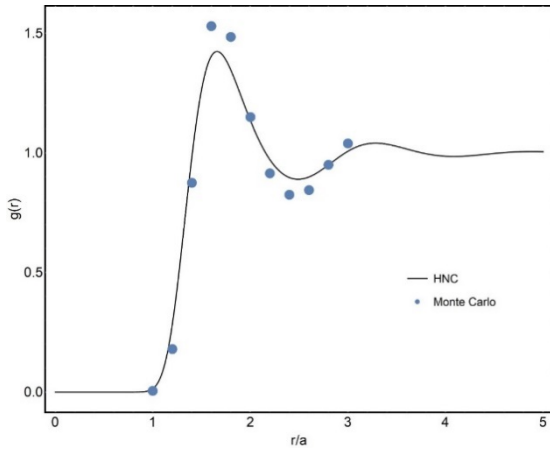
Одной из основных экспериментальных характеристик плотной плазмы является статический структурный фактор [10], который определяется как Фурье–образ радиальной функции распределения:

$$S_{\alpha\beta}(k) = \delta_{\alpha\beta} + n \int d\vec{r} [g_{\alpha\beta}(r) - 1] \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{r}). \quad (14)$$

Далее получены и проанализированы радиальные функции распределения и статические структурные факторы в гиперцепном приближении для плазмы с учетом эмпирической суммы мостиковых диаграмм [5].

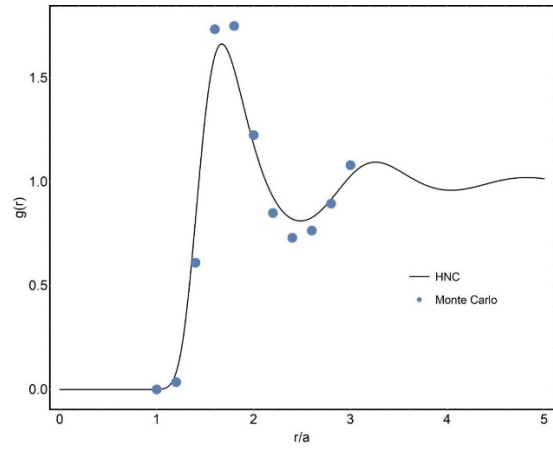
На рисунках 1–2 приведены графики радиальной функции распределения при различных параметрах плазмы, полученные методом гиперцепного приближения (сплошная линия) и методом Монте-Карло (точки).

Из графиков видно, что радиальная функция распределения, рассчитанная методом ННС, находится в определенном согласии с радиальной функцией распределения, рассчитанной методом МС при различных параметрах неидеальности плазмы.



$\Gamma = 40$

Рисунок 1 – Радиальная функция распределения



$\Gamma = 75$

Рисунок 2 – Радиальная функция распределения

### Модифицированный метод гиперцепного приближения (MHNC)

Два самых важных метода интегрального исчисления ведут к уравнению Перкуса-Йевика и уравнениям гиперцепного приближения. Оба они могут быть получены диаграммным анализом  $g(r)$ , при этом игнорируя определенный класс диаграмм. Понятно, что если известна функция той диаграммы, которая не была учтена, то можно

записать модифицированные интегральные уравнения и получить новую радиальную функцию распределения  $g(r)$ . В теории Перкуса-Йевика и гиперцепном приближении, диаграммный метод интегральных уравнений хорошо сформулирован. В то же время, существуют гибридные и смешанные методы интегрального исчисления, в которых диаграммный базис менее отчетливый.

Интегральное уравнение Перкуса-Йевика для твердых сфер записывается в виде [11]

$$\tau(\vec{r}) = 1 + n \int_{|\vec{r}'| < R} \tau(\vec{r}') d\vec{r}' - n \int_{|\vec{r}'| < R, |\vec{r} - \vec{r}'| > R} \tau(\vec{r}') \tau(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}', \quad (15)$$

где  $R$  диаметр твердой сферы,  $n$  плотность частиц. Функция  $\tau(\vec{r})$  относится к прямой корреляционной функции и радиальной функции распределения уравнения Орнштейн-Цернике следующим образом

$$\begin{aligned} g(\vec{r}) &= 0 & (r < R), \\ g(\vec{r}) &= \tau(\vec{r}) & (r > R), \\ C(\vec{r}) &= -\tau(\vec{r}) & (r < R), \\ C(\vec{r}) &= 0 & (r > R). \end{aligned} \quad (16)$$

Прямая корреляционная функция [12] определяется из следующего соотношения

$$C_{PY}(x) = -(1 - \eta)^{-4} [(1 + 2\eta)^2 - 6\eta(1 + \frac{1}{2}\eta)^2 x + \eta(1 + 2\eta)^2 \frac{1}{2}\eta x^3], \quad (17)$$

где  $x = (r/R)$ ,  $\eta$  – упаковочный параметр.

Радиальная функция распределения для твердых сфер в однородном нейтральном фоне может быть найдена в виде [13]

$$\tilde{g}_0(k) = \frac{\tilde{C}(k)}{1 - \rho \tilde{C}(k)}. \quad (18)$$

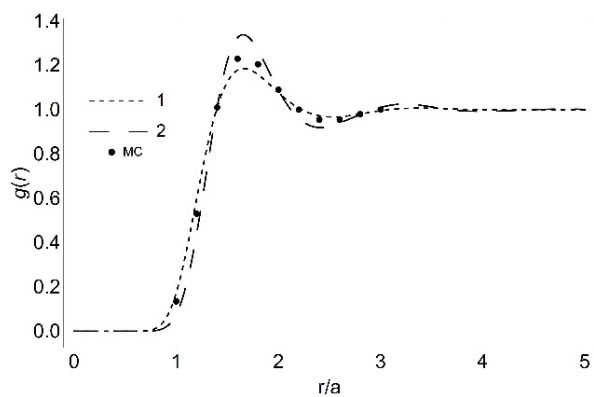
$$g_{PY}(r) = g_0(r) + 1$$

Далее зная радиальную функцию распределения для твердых сфер, можно получить функцию мостиковых поправок [14]

$$B(x, \eta) = y_{PY}(x, \eta) - 1 - \ln y_{PY}(x, \eta). \quad (19)$$

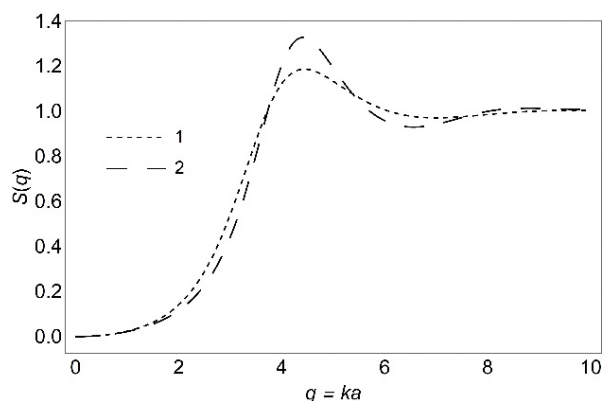
Графики радиальной функции распределения и статического структурного фактора, полученные в рамках модифицированного гиперцепного приближения при различных параметрах связи приведены на рисунках 3-8.





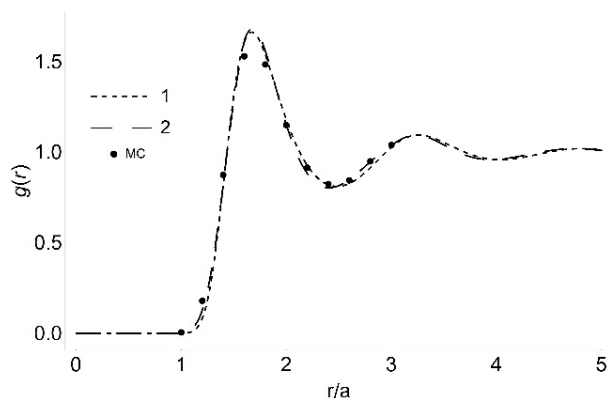
$\Gamma = 16$ , 1 – HNC, 2 – МННС, точки – МС

**Рисунок 3** – Радиальная функция распределения для Кулоновского потенциала



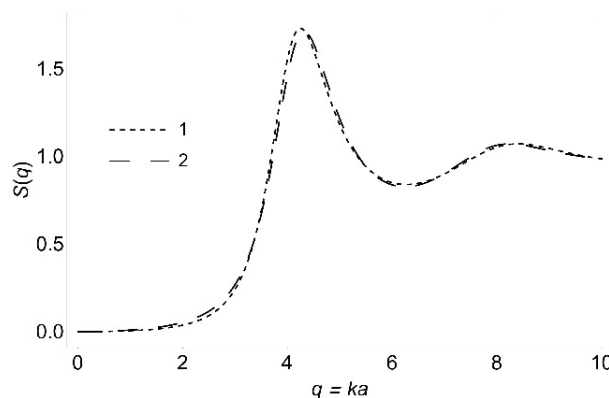
$\Gamma = 16$ , 1 – HNC, 2 – МННС

**Рисунок 4** – Статический структурный фактор для Кулоновского потенциала



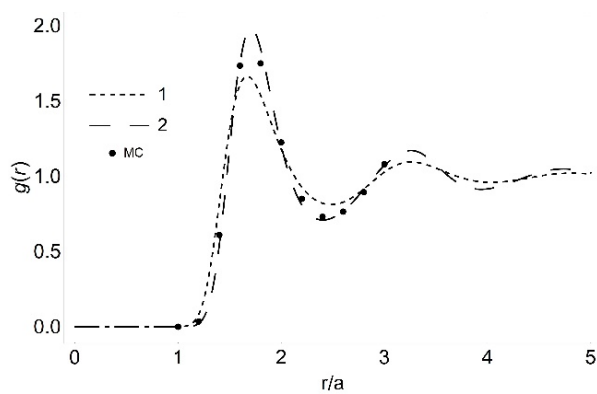
$\Gamma = 40$ , 1 – HNC, 2 – МННС, точки – МС

**Рисунок 5** – Радиальная функция распределения для Кулоновского потенциала



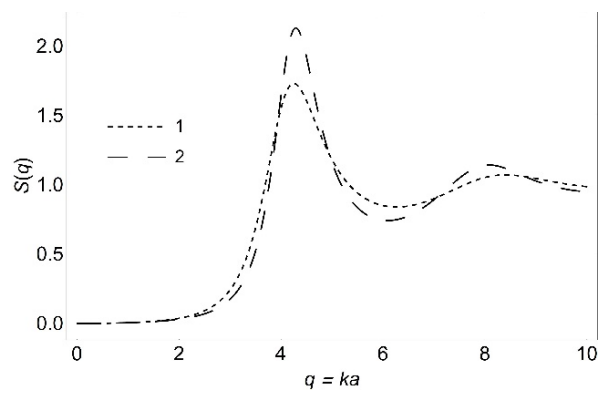
$\Gamma = 40$ , 1 – HNC, 2 – МННС

**Рисунок 6** – Статический структурный фактор для Кулоновского потенциала



$\Gamma = 75$ , 1 – HNC, 2 – МННС, точки – МС

**Рисунок 7** – Радиальная функция распределения для Кулоновского потенциала



$\Gamma = 75$ , 1 – HNC, 2 – МННС

**Рисунок 8** – Статический структурный фактор для Кулоновского потенциала

Из графиков видно, что радиальная функция распределения и статический структурный фактор, рассчитанные методом МННС находятся в лучшем согласии с методом МС по сравнению с методом ННС.

**Вариационный модифицированный метод гиперцепного приближения (VMHNC)**

Процедура получения [15]  $g(r)$  для заданного потенциала  $\phi(r)$  с температурой  $\beta$  и плотностью  $\rho_i$  происходит следующим образом. Решаются уравнения МННС используя  $B_{HSPY}(r, \eta)$  для различных значений  $\eta$ :

$$h(r) = c(r) + \rho_i \int dr' h(|r - r'|) c(r'),$$

$$\ln[g(r)] = -\beta\phi(r) + h(r) - c(r) + B_{HSPY}(r, \eta), \quad (20)$$

$$h(r) = g(r) - 1.$$

Здесь необходимо варьировать значение  $\eta$  до тех пор, пока избыточная свободная энергия  $f_{\phi}^{VMHNC}(\beta, \rho_i, \eta) = \beta F(\beta, \rho_i, \eta) / N$  не примет минимальное значение при определенном значении  $\eta = \eta_{eff}$ . Радиальная функция распределения является решением уравнений МННС с мостиковой поправкой  $B_{HSPY}(r, \eta)$  и избыточной свободной энергией системы [16].

Один из вариантов решения уравнений МННС использовать метод Ng [5] для ОКП систем, который заключается в отображении дальнедействующей системы в короткодействующую. В случае с юкавовской однокомпонентной плазмы (ЮОКП), эта процедура заключается в представлении потенциала Юкавы  $u_Y(r)$  [6] в виде суммы двух членов, дальнедействующего потенциала  $u_{Y,L}(r)$  и короткодействующего потенциала  $u_{Y,S}(r)$ . В силу асимптотического поведения прямой корреляционной функции  $c(r)$ , потенциал  $-u_{Y,L}(r)$  может быть взят в виде дальнедействующей части  $c(r)$ . В таком случае

вводят короткодействующую часть прямой корреляционной функции  $c_S(r)$

$$c(r) = c_S(r) - u_{Y,L}(r). \quad (21)$$

Далее потенциалы  $u_{Y,L}(r)$  и  $u_{Y,S}(r)$  переписываются с использованием интегралов ошибок в следующем виде. Тогда, согласно методике изложенной в работе [5]

$$u_{Y,L}(r) = u_Y(r) \operatorname{erf}(\alpha_{NG} r)$$

$$u_{Y,S}(r) = u_Y(r) \operatorname{erfc}(\alpha_{NG} r), \quad (22)$$

$$u_Y(r) = u_{Y,L}(r) + u_{Y,S}(r)$$

где  $\alpha_{NG} = 1.08$ , как и для ОКП см.[5], взято в таком же виде и для ЮОКП. Для потенциала Кулона  $\kappa = 0$ ,  $u_Y(r)$  согласовывается на 99% и более с  $-c(r)$  в широком диапазоне  $r$  и  $\Gamma$ .

Используя такое разложение уравнения МННС могут быть легко решены в единицах  $a_{ws}$

$$h(r) = -u_{Y,L}(r) - \frac{3}{4\pi} \int dr' h(|r - r'|) u_{Y,L}(r') +$$

$$+ c_S(r) + \frac{3}{4\pi} \int dr' h(|r - r'|) c_S(r'), \quad (23)$$

$$\ln[g(r)] = -u_{Y,S}(r) + h(r) - c_S(r) + B_{HSPY}(r),$$

для свободной энергии использовалось выражение

$$f_Y^{VMHNC}(\Gamma, \kappa, \eta) =$$

$$= -\frac{\Gamma\kappa}{2} - \frac{3}{8\pi} \int dr \left[ -\frac{1}{2} h(r)^2 - h(r) u_{Y,L}(r) + \right. \quad (24)$$

$$\left. + g(r) c_S(r) + u_{Y,S}(r) \right] - \frac{1}{12} \pi^2 \int dk \times$$

$$\times \{ \ln[1 + \tilde{h}(k)] - \tilde{h}(k) \} + \delta_{\phi}(\eta) + \Delta_{PY}(\eta).$$

Ниже приведены рассчитанные данные для параметра  $\eta_{eff}$  при различных  $\kappa$  и  $\Gamma$ .

**Таблица 1** – Значение параметра  $\eta_{eff}$  при  $k = 0$  и различных значениях параметров  $\Gamma$

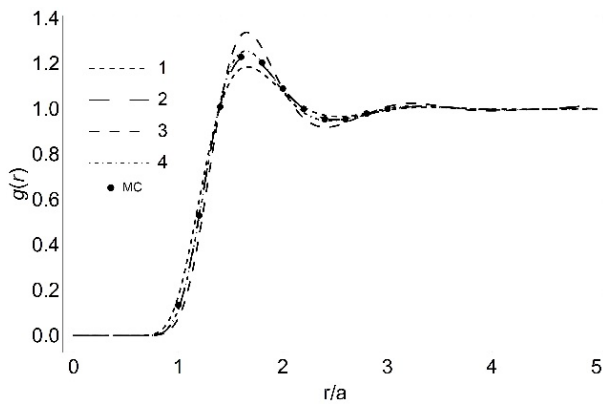
k = 0	$\Gamma = 5$	$\Gamma = 10$	$\Gamma = 16$	$\Gamma = 20$	$\Gamma = 35$	$\Gamma = 50$	$\Gamma = 65$	$\Gamma = 75$	$\Gamma = 80$
$\eta_{eff}$	0,17	0,21	0,26	0,28	0,29	0,31	0,37	0,37	0,43

**Таблица 2** – Значение параметра  $\eta_{eff}$  и соответствующие значения свободной энергии при  $k = 1$  и различных значениях параметров  $\Gamma$

$k = 1$	$\Gamma = 30$	$\Gamma = 50$	$\Gamma = 100$
$\eta_{eff}$	0.28	0.29	0.36
$\int_Y^{VMHNC}(\Gamma, \kappa, \eta)$	-27.0989	-46.217	-94.6465

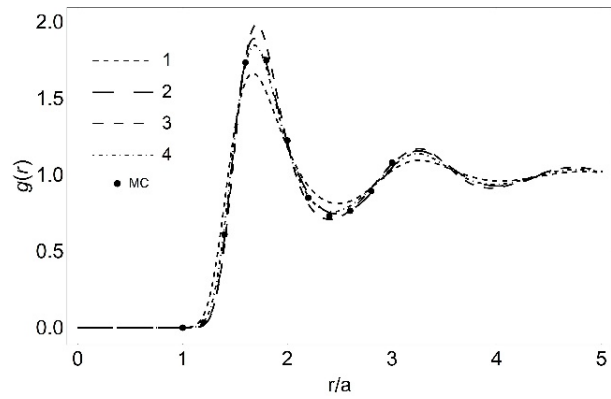
**Таблица 3** – Значение параметра  $\eta_{eff}$  и соответствующие значения свободной энергии при  $k = 3$  и различных значениях параметров  $\Gamma$

$k = 2$	$\Gamma = 30$	$\Gamma = 50$	$\Gamma = 100$
$\eta_{eff}$	0.25	0.27	0.31
$\int_Y^{VMHNC}(\Gamma, \kappa, \eta)$	-36.1967	-60.9926	-123.396



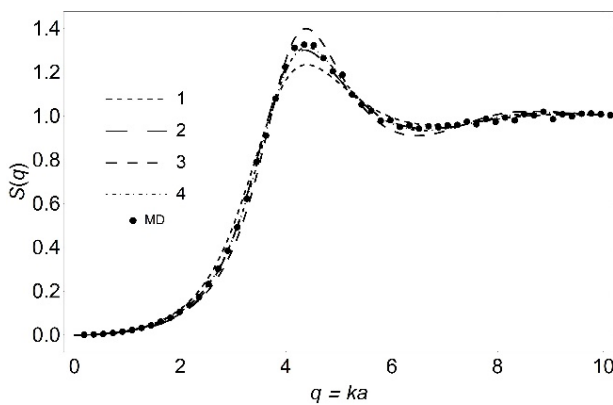
$\Gamma = 16$ , 1 – HNC, 2 – HNC Ng [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, точки – MC

**Рисунок 9** – Сравнение радиальных функций распределения, полученных различными методами в кулоновской системе



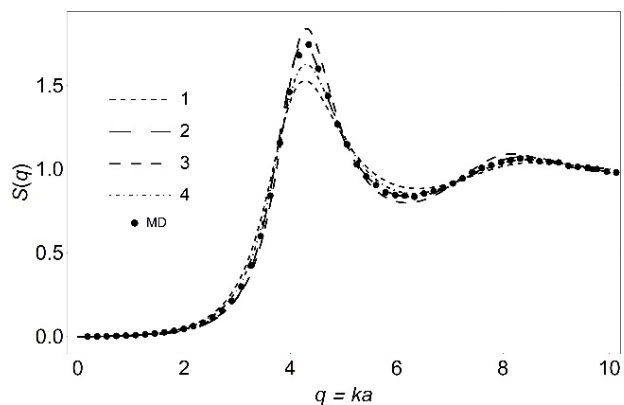
$\Gamma = 75$ , 1 – HNC, 2 – HNC Ng [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, точки – MC

**Рисунок 10** – Сравнение радиальных функций распределения, полученных различными методами в кулоновской системе



$\Gamma = 20$ , 1 – HNC, 2 – HNC Ng [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, точки – MD

**Рисунок 11** – Сравнение статических структурных факторов, полученных различными методами в кулоновской системе



$\Gamma = 50$ , 1 – HNC, 2 – HNC Ng [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, точки – MD

**Рисунок 12** – Сравнение статических структурных факторов, полученных различными методами в кулоновской системе

Графики радиальной функции распределения и статического структурного фактора, полученные в рамках вариационного модифицированного гиперцепного приближения при различных параметрах связи приведены на рисунках 9-12.

Из графиков видно, что радиальная функция распределения и статический структурный фактор рассчитанные методом VMHNC находятся в отличном согласии с методами MC и MD.

### Некоторые эмпирические формулы статического структурного фактора

Парная функция распределения и статический структурный фактор однокомпонентной кулоновской системы были представлена в [17] в параметризованном виде как функции параметра связи  $\Gamma$ . Эти функции основаны на компьютерных симуляциях молекулярной динамики, которые захватывают весь диапазон жидкой фазы ( $0 \leq \Gamma \leq 180$ ). В данной работе использовались разные формы параметризованных функций для слабо и сильно связанных систем. Для параметра связи  $\Gamma < 5$ , в слабо связанной системе, формула для радиальной функции распределения  $g_{weak}(r)$  включает в себя нелинейный вклад Дебая-Хюкеля, в то время как, в сильно связанной системе, форма  $g_{strong}(r)$  учитывает осцилляции после первого пика  $g(r)$  и их последующие затухания:

$$g_{fit}(r) = \begin{cases} g_{weak}(r), & \Gamma \leq 5, \\ g_{strong}(r), & \Gamma > 5, \end{cases} \quad (25)$$

$$g_{weak}(r) = e^{-\frac{\rho}{r}} e^{-\eta r} + \chi e^{-\frac{(r-\rho)^2}{\tau}}, \quad (26)$$

$$g_{strong}(r) = \begin{cases} \sigma e^{-\mu(-x)^\nu}, & x \leq 0, \\ 1 + (\sigma - 1) \frac{\cos(\alpha x + \beta \sqrt{x})}{\cosh(x\Lambda(x))}, & x > 0 \end{cases}, \quad (27)$$

$$x = \frac{r}{\zeta} - 1, \quad (28)$$

$$\Lambda(x) = (\delta - \varepsilon) \exp\left(-\sqrt{\frac{x}{\gamma}}\right) + \varepsilon, \quad (29)$$

здесь, расстояние  $r$  измеряется в единицах радиуса Вигнера-Зейца  $a$ .

Параметризованный вид функции статического структурного фактора, приведенный там же, имеет следующий вид:

$$S_{fit}(k) = \begin{cases} S_H(k), & \Gamma \geq 60, \\ S_L(k), & \Gamma < 60, \end{cases}, \quad (30)$$

$$S_H(k) = \begin{cases} S_i(k), & k \geq k_-, \\ S_{high}(k), & \end{cases}, \quad (31)$$

$$S_L(k) = S_i(k)W(k) + S_{low}(k)(1 - W(k)), \quad (32)$$

$$S_{high}(k) = \frac{S_m \left(\frac{k}{k_m}\right)^2}{1 + \omega(k - k_m)^2},$$

$$S_{low}(k) = \frac{k^2}{k^2 + 3\Gamma}, \quad (33)$$

$$W(k) = \frac{1}{2} \left( 1 + \tanh\left(\frac{k - k_t}{\delta k}\right) \right),$$

$k_-$  определяется как

$k_- = \arg \max_k (S_{high}(k) \geq S_i(k))$ ,  $S_i(k)$  – ионный структурный фактор,

Кроме параметризованных формул для радиальной функции распределения и статического структурного фактора, полученных в статье [17], был проведен анализ результатов работы [18], в которой получены эмпирические формулы для статического структурного фактора. В последней статье, формула статического структурного фактора  $S(k)$  была получена на основе значений  $S(k)$  протабулированных в [15], в рамках модифицированного метода гиперцепного приближения для однокомпонентной кулоновской системы.

Из данных [18] формула для статического структурного фактора имеет вид:

$$S(q, \Gamma) = \frac{1}{1 + 3\Gamma / q^2 - c_s(q, \Gamma)}. \quad (34)$$

Входящая в знаменатель правой части функция  $c_s(q, \Gamma)$  привносит осцилляции в функцию  $S(q, \Gamma)$ . В связи с этим, функция  $c_s(q, \Gamma)$  разбивается на сегментные кусочки, каждый из которых отвечает пику, наблюдаемых в функции  $S(q, \Gamma)$ .

Также, были проанализированы формулы, предложенным в [15]. Здесь рассмотрена юкавовская сильносвязанная система, а радиальная функция распределения определяется по формуле

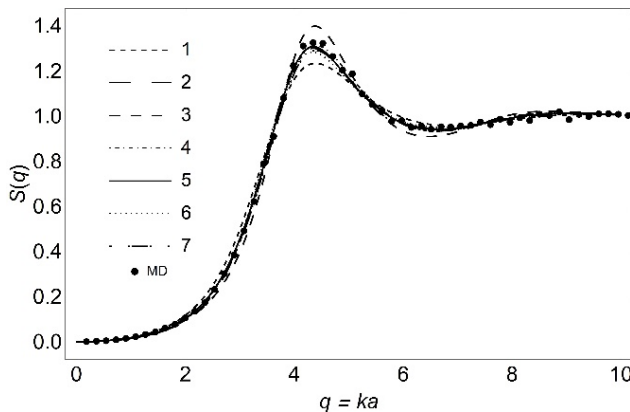
$$g(r) = \exp[-\beta u(r) + h(r) - c(r) + B(r)], \quad (35)$$

где  $B(r)$  – функция мостиковой поправки:

$$B(r) = B_{OCP}(\Gamma, r) \exp\left(-\frac{k^2}{4}\right). \quad (36)$$

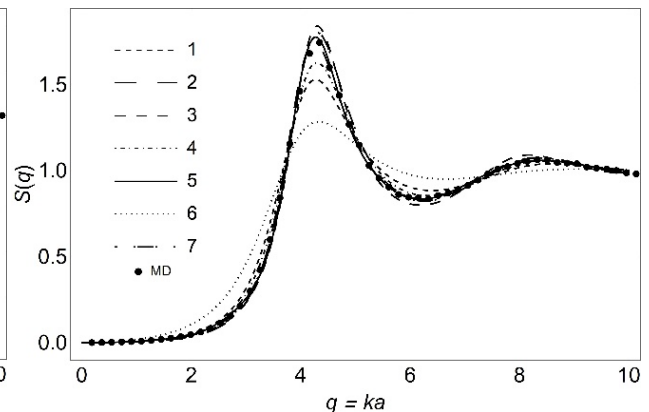
Формула (36) в отдельных случаях дает отличное согласие с МД моделированием и удовлетворяет правилу сумм сжимаемости. Для однокомпонентной кулоновской системы используется функция мостиковой поправки  $B_{OCP}(\Gamma, r)$ , определяемая по формулам из [20].

На рисунках 13-14 представлены сравнительные графики статических структурных, которые рассчитаны на основе аналитических методов и на основе вышеприведенных фитинговых формул.



$\Gamma = 20$ , 1 – HNC, 2 – HNC [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, 5 – [15], 6 – [18], 7 – [16], точки – МД.

**Рисунок 13** – Сравнение статических структурных факторов, полученных различными методами в кулоновской системе



$\Gamma = 50$ , 1 – HNC, 2 – HNC [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, 5 – [15], 6 – [18], 7 – [16], точки – МД

**Рисунок 14** – Сравнение статических структурных факторов, полученных различными методами в кулоновской системе

Из графиков видно, что статические структурные факторы, рассчитанные на основе фитинговых формул хорошо согласуются с данными, полученными методом VMHNC.

### Метод моментов. Неравенство Коши-Шварца

Особое место среди методов исследования плотных кулоновских систем занимает метод моментов. Суть его состоит в том, что, как показано в работах [6,7,20], функция линейного отклика системы заряженных частиц, то есть обратная диэлектрическая функция, может быть восстановлена по первым нерасходящимся

моментам мнимой части последней. Эти моменты являются коэффициентами асимптотического разложения обратной диэлектрической функции на высоких частотах. При этом, так называемая, функция-параметр Неванлинны, фигурирующая в соответствующей формуле теории моментов и обладающая определенными математическими свойствами, моделируется из простых физических соображений так, чтобы давать «правильное» значение некоторой статической характеристики плазмы на нулевой частоте, например, статической проводимости. При этом основной задачей метода является прямое вычисление степенных моментов, на основе теории линейного отклика, через

статические структурные характеристики системы.

Основным достоинством метода моментов является то, что он позволяет определять динамические структурные факторы по рассчитанным статическим характеристикам, задавая определенный вид функции-параметра Неванлинны. Особую привлекательность придает возможность проведения расчетов для жидких непертурбативных систем при любых параметрах связи  $\Gamma$ . При этом не требуется проводить никакого разложения по степени неидеальности, как, например, в кинетической теории.

Метод моментов в ОКП позволяет оперировать любым числом сходящихся правил сумм [21-25]:

$$S_\nu(k) = \frac{1}{n} \int_{-\infty}^{\infty} \omega^\nu S(k, \omega) d\omega, \quad \nu = 0, 1, 2, 3, 4. \quad (37)$$

Нулевой момент, очевидно, равен статическому структурному фактору  $S_0(k) = S(k)$ , тогда как второй момент представляет собой правило сумм

$$S_2(k) = \omega_0^2(k) = \omega_p^2 \left( \frac{k^2}{k_D^2} \right) = \omega_p^2 \left( \frac{q^2}{3\Gamma} \right), \quad (38)$$

а четвертый момент имеет вид,

$$S_4(q) = \omega_p^2 \omega_0^2(q) \left\{ 1 + \frac{q^2}{\Gamma} + U(q) \right\}. \quad (39)$$

Здесь  $q = ka$ ,  $\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n e^2}{m}}$  обозначает

плазменную частоту и  $k_D = \sqrt{\frac{4\pi n e^2 Z^2 \beta}{m}}$  обратная длине волны Дебая, масса  $m$ , и слагаемое, описывающее вклад потенциальных взаимодействий

$$U(q) = \frac{1}{4\pi^2 n} \int_0^\infty [S(k') - 1] f(k'; k) k'^2 dk' = \frac{1}{3\pi} \int_0^\infty [S(p) - 1] f(p; q) p^2 dp, \quad (40)$$

где использовано обозначение

$$f(p; q) = \frac{5}{6} - \frac{p^2}{2q^2} + \left( \frac{p^3}{4q^3} - \frac{p}{2q} + \frac{q}{4p} \right) \ln \left| \frac{q+p}{q-p} \right|, \quad (41)$$

$$q = ka$$

$$p = k'a. \quad (42)$$

Частоты  $\omega_1(k)$  и  $\omega_2(k)$  определяются соответствующими отношениями моментов [21-25]:

$$\omega_1^2 = \omega_1^2(k) = \frac{S_2(k)}{S_0(k)} \quad (43)$$

$$\omega_2^2 = \omega_2^2(k) = \frac{S_4(k)}{S_2(k)}. \quad (44)$$

Здесь, важным условием является соблюдение неравенства Коши-Шварца [6,19], которое удобно переписать через моментные частоты в виде

$$b(q, \kappa) = \omega_2(q, \kappa) - \omega_1(q, \kappa) > 0. \quad (45)$$

На рисунке 15 построен график функции  $b(q, \kappa)$  для различных методов, где 1 – HNC, 2 – HNC с бриджфункцией [5], 3 – MHNC, 4 – VMHNC, 5 – [17], 6 – [20], 7 – [18].

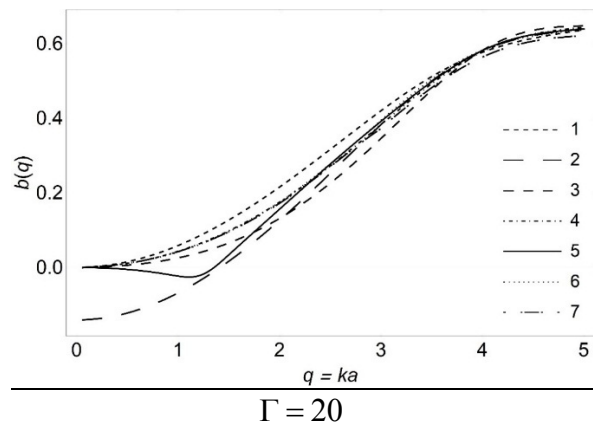


Рисунок 15 – Функция  $b(q, \kappa)$  для различных методов в кулоновской системе

Таким образом, используя неравенство (45) нетрудно проверить выполняется ли искомое неравенство для выбираемых методик расчета статических корреляционных характеристик (корреляционных функций, статических структурных факторов). Выполнение неравенства

свидетельствует о правильности выбранного метода расчета.

Графический анализ, показанный на рисунке 15, проведенный для вышеописанных методов расчета (HNC, MHNC, VMHNC, Перкуса-Йевики и аналитических моделей), показал, что использование функциональной зависимости  $b(q, k)$  (45), включающей в себя частотные моменты, которые определяются в рамках метода моментов, приводит к следующему выводу.

### Заключение

В данной работе были проанализированы методы получения статических структурных факторов, а именно, решение интегральных уравнений Орнштейн-Цернике и Перкуса-

Йевики, методы VMHNC, а также фитинговые формулы. Показано, что кроме фитинговых соотношений из [17], и метода гиперцепного приближения с учетом эмпирической формулы функции мостиковой поправки согласно [5], остальные методы дают выражения для корреляционных функций, удовлетворяющие неравенству Коши-Шварца: метод гиперцепного приближения согласно [5], модифицированный метод гиперцепного приближения согласно [18], вариационный модифицированный метод гиперцепного приближения согласно [16], эмпирические формулы работ [18-20].

**Благодарности.** Работа поддержана грантом Министерства образования и науки Республики Казахстан № AP05132333.

### Литература

- 1 Баимбетов Ф.Б. и др. Основы физики управляемого термоядерного синтеза.-Алматы-Курчатов. – 2004. – 232 с.
- 2 Архипов Ю.В., Баимбетов Ф.Б., Давлетов А.Е., Стариков К.В. Псевдопотенциальная теория плотной высокотемпературной плазмы. – Алматы: «Қазақ Университеті», 2002. – 113 с.
- 3 Binder, K. & Heermann, D.W. Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction (4th edition).- Springer. – 2002.- ISBN 3-540-43221-3.
- 4 M. Griebel; S. Knapek; G. Zumbusch Numerical Simulation in Molecular Dynamics. Berlin, Heidelberg. – Springer. – 2007. – ISBN 978-3-540-68094-9.
- 5 Ng K.–Ch. Hypernetted chain solutions for the classical one–component plasma up to  $\Gamma = 7000$  // J. Chem. Phys. – 1974. – Vol. 61. – P. 2680–2689.
- 6 Arkhipov Yu.V., Askaruly A., Davletov A.E., Dubovtsev D.Yu., Donko Z., Hartmann P., Korolov I. Conde L. and Tkachenko I.M. Direct determination of dynamic properties of Coulomb and Yukawa one-component plasmas // Phys. Rev. Lett. – 2017. – Vol 119. – P. 045001.
- 7 Adamjan S.V., Tkachenko I.M., Munoz–Cobo Gonzalez J.L., Verdu Martin G. Dynamic and static correlations in model Coulomb systems // Phys. Rev. E. – 1993. – Vol. 48. – P. 2067–2072.
- 8 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E., Tkachenko I.M. Optical properties of Kelbg-pseudopotential-modelled plasmas // Contributions to Plasma Physics – 2013. – Vol. 53. – P. 375-384.
- 9 Архипов Ю.В., Ашикбаева А.Б., Аскарулы А., Ткаченко И.М. Исследование диэлектрических функций плотной плазмы // Международная научная конференция «Актуальные проблемы современной физики» – Алматы, 2013. – С. 169
- 10 Марч Н., Тоси М. Движение атомов жидкости. – М.: Металлургия, 1980. – 296 с.
- 11 Wertheim M. S. Exact solution of the Percus-Yevick integral equation for hard spheres // Phys. Rev. Lett. – 1963. – Vol. 10. – P. 321
- 12 G. Faussurier. Gibbs-Bogolyubov inequality and transport properties for strongly coupled Yukawa fluids // Phys. Rev. E. – 2003. – Vol. 67. – P. 046404
- 13 Lado F. Charged hard spheres in a uniform neutralizing background using ‘mixed’ integral equations // Mol. Phys. – 1976. – Vol. 31. – P 1117.
- 14 Rosenfeld Y. Comments on the Variational Modified-Hypernetted-Chain Theory for Simple Fluids // J. Stat. Phys. – 1986. – Vol. 42. – P. 437.
- 15 Rosenfeld Y., Aschcroft N.W. Theory of simple classical fluids: Universality in the short–range structure // Phys.Rev.A. – 1979. – Vol.20. – P. 1208–1235.
- 16 Faussurier G. Description of strongly coupled Yukawa fluids using the Variational modified hypernetted chain approach // Phys. Rev. E. – 2004. – Vol. 69. – P 066402.
- 17 Desbiens N. et al. Parametrization of pair correlation function and static structure factor of the one component plasma across coupling regimes // Physics of Plasma. – 2016. – Vol 23. – P. 092120.
- 18 Young D. A. et al. Analytic fit to the one-component-plasma structure factor. // Phys. Rev. A. – 1991. – Vol. 44. – P. 6508.
- 19 Daughton W., Murillo M.S., Thode L. Empirical bridge function for strongly coupled Yukawa systems // Phys. Rev. E. – 2000. – Vol 61. – No 2. – P.2129-2132.
- 20 Iyetomi H., Ogata Sh, Ichimaru S. Bridge functions and improvement on the hypernetted-chain approximation for classical one-component plasmas // Phys. Rev. A. – 1992. – Vol. 46. – No. 2. – P 1051-1058.
- 21 Tkachenko I. M., Arkhipov Yu .V., Askaruly A. // The Method Of Moments and its Applications in Plasma Physics // Lambert Academic Publishing. Saarbrucken. Germany. – 2012. – 125 p.

- 22 Tkachenko I.M., Alcober J. and Fernandez de Cordoba P. Electronic correlations in real and model plasmas // J.Phys. IV France. – 2000. – Vol. 10. – P. 199-202.
- 23 Arkhipov Yu.V., A.B. Ashikbayeva, Askaruly A., Davletov A.E., Tkachenko I.M. Dynamic conductivity of Kelbg-pseudopotential – modeled plasmas // International Journal of Mathematics and Physics – Алматы, 2013. – Vol. 4. – P. 38-43.
- 24 Arkhipov Yu.V., Ashikbayeva A.B., Askaruly A., Davletov A.E., Voronkov V.V., Tkachenko I.M. Statical structural properties of nonideal plasma // International Journal of Mathematics and Physics. – Almaty, 2013. – Vol.4, № 1. – P. 80-84.
- 25 Adamyan V. M., Tkachenko I.M. Sum rules and exact relations for quantal Coulomb systems // Contrib. Plasma Phys. – 2003. – Vol. 43. – P. 252-257.

### References

- 1 F.B. Baimbetov i dr. Osnovy fiziki upravlyayemogo termoyadernogo sinteza. (Almaty-Kurchatov, 2004), 232 s. (in Russ).
- 2 Yu.V. Arkhipov, F.B. Baimbetov, A.Ye. Davletov, K.V. Starikov Pseudopotentsial'naya teoriya plotnoy vysokotemperaturnoy plazmy, (Qazaq, Universiteti, Almaty, 2002), 113 s. (in Russ).
- 3 K. Binder & D.W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An Introduction (4th edition), (Springer, 2002), ISBN 3-540-43221-3.
- 4 M. Griebel; S. Knapek; G. Zumbusch Numerical Simulation in Molecular Dynamics. Berlin, Heidelberg, (Springer, 2007), ISBN 978-3-540-68094-9.
- 5 Ng K.–Ch. J. Chem. Phys, 61, 2680 (1974).
- 6 Yu.V. Arkhipov et al., Phys. Rev. Lett., 119, 045001 (2017).
- 7 S.V. Adamjan et al., Phys. Rev. E. 48, 2067 (1993).
- 8 Yu.V. Arkhipov et al., Contributions to Plasma Physics, 53, 375 (2013).
- 9 Yu.V. Arkhipov i dr. Mezhdunarodnaya nauchnaya konferentsiya «Aktual'nyye problemy sovremennoy fiziki», 169 (2013). (in Russ).
- 10 N. March, M. Tosi Dvizheniye atomov zhidkosti, (M.: Metallurgiya, 1980), 296 s. (in Russ).
- 11 M.S. Wertheim, Phys. Rev. Lett., 10, 321 (1963).
- 12 G. Faussurier, Phys. Rev. E., 67, 046404 (2003).
- 13 F. Lado Mol. Phys., 31, 1117 (1976).
- 14 Y. Rosenfeld, J. Stat. Phys., 42, 437 (1986).
- 15 Y. Rosenfeld, N.W. Aschcroft, Phys.Rev.A., 20, 1208 (1979).
- 16 G. Faussurier, Phys. Rev. E., 69, 066402 (2004).
- 17 N. Desbiens et al., Physics of Plasma, 23, 092120 (2016).
- 18 D.A. Young et al., Phys. Rev. A., 44, 6508 (1991).
- 19 W. Daughton et al., Phys. Rev. E., 61, 2129 (2000).
- 20 H. Iyetomi et al., Phys. Rev. A., 46, 1051 (1992).
- 21 I.M. Tkachenko, Yu.V. Arkhipov, and A.Askaruly, The Method Of Moments and its Applications in Plasma Physics, (Lambert Academic Publishing, Germany, 2012), 125 p.
- 22 I.M. Tkachenko et al., J.Phys. IV France, 10, 199 (2000).
- 23 Yu.V. Arkhipov et al., Inter. J Math. Ph., 4, 38 (2013).
- 24 Yu.V. Arkhipov et al., Inter. J Math. Ph., 4, № 1, 80 (2013).
- 25 V.M. Adamyan and I.M. Tkachenko, Contrib. Plasma Phys., 43, 252 (2003).



**Утегенов А.У., Тажен А.Б., Райымханов Ж., Камбаров А.А.**

Казахский национальный университет имени аль-Фараби,  
Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики,  
Казахстан, г. Алматы, e-mail: almasbek@physics.kz

## **ТЕПЛОВАЯ ЭРОЗИЯ ГРАФИТОВОЙ МИШЕНИ ПОД ВОЗДЕЙСТВИЕМ ИНТЕНСИВНОГО ИМПУЛЬСНОГО ПЛАЗМЕННОГО ПОТОКА**

В данной работе представлены результаты по экспериментальному исследованию взаимодействия импульсного плазменного потока с кандидатным материалом первой стенки ТЯЭР – графитовыми пластинами. Для получения импульсного плазменного потока, а также для имитации и экспериментального моделирования срыва плазменного шнура на стенку, экспериментальная установка импульсный плазменный ускоритель был использован в этой работе. Графитовые пластины были облучены 25 импульсами плазменного потока. На основе электронно-силовой микроскопии были получены СЭМ изображения графитовых образцов после воздействия на них серии импульсов плазменного потока в двух различных напряжениях разряда 5 кВ и 11 кВ. Также показаны Рамановские спектры исходных образцов, проведена оптическая диагностика поверхностей. По Рамановскому спектру было выявлено, что образцы графита в обоих случаях имеют дефектную структуру. В эксперименте также было обнаружено, что на поверхности графитовых пластин образуются медные пленки, данное обусловлено главным образом осаждением молекул меди, вырванных с поверхности электродов ускорителя во время зажигания разряда в межэлектродном пространстве. Полученные результаты хорошо изучены, анализированы и сопоставлены с результатами, полученными в ТЯЭР.

**Ключевые слова:** импульсный плазменный ускоритель, ТЯЭР, кандидатный материал.

Utegenov A.U., Tazhen A.B., Rayymkhanov Zh., Kambarov A.A.  
Al-Farabi Kazakh National University, Institute of Experimental and Theoretical Physics,  
Kazakhstan, Almaty, e-mail: almasbek@physics.kz

### **Heat erosion of the graphite target under effects of intensive pulse plasma flow**

In this work the results of an experimental investigation of the interaction of a pulsed plasma flow with a candidate material – graphite plates of the first wall of ITER are presented. To generate a pulsed plasma flow, as well as to simulate and experimental modeling the breakdown of a plasma flow on a wall, an experimental setup pulsed plasma accelerator was used in this work. Graphite plates were irradiated with 25 pulses of plasma flow. On the basis of electron-force microscopy, SEM images of graphite samples were obtained after exposure to a series of pulsed plasma flow in two different discharge voltages of 5 kV and 11 kV. The Raman spectrum of the initial samples are also shown, and optical diagnostics of the surfaces is performed. According to the Raman spectrum, it was found that samples of graphite in both cases have a defective structure. The experiment also found that copper films are formed on the surface of graphite plates, this is mainly due to the deposition of copper molecules, ejected from the surface of the electrodes during ignition of the arc discharge in the interelectrode space. The results are well studied, analyzed and compared with the results taken in the ITER.

**Key words:** pulsed plasma accelerator, ITER, candidate material.

Утегенов А.У., Тажен А.Б., Райымханов Ж., Қамбаров Ә.А.

Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті,  
Эксперименттік және теориялық физика ғылыми зерттеу институты,  
Қазақстан, Алматы қ., e-mail: almasbek@physics.kz

### Графит нысананың интенсивті плазмалық ағынның әсерінен жылулық эрозиясы

Бұл жұмыста ТЯЭР бірінші реттік қабырғасына кандидат материал – графит пластиналарының импульстік плазма ағынымен әсерлесуінің эксперименттік зерттеу нәтижелері көрсетілген. Импульстік плазма ағынын алу үшін және де плазмалық белдеудің үзіліп, қабырғамен әсерлесу процессін тәжірибеде имитациялау және эксперименттік модельдеу мақсатында бұл жұмыста импульстік плазмалық үдеткіш эксперименттік қондырғысы қолданылды. Графит пластиналардың беткі қабаты импульстік плазмалық ағынның 25 импульсімен сәулелендірілді. Электрондық күштік микроскоп әдісінің негізінде 5 кВ және 11 кВ кернеу шамаларында импульстік плазма ағынымен әсерлескеннен кейінгі графит үлгілерінің СЭМ бейнелері алынды. Бұл жұмыста алынған үлгілердің Раман спектрлері көрсетілген, олардың бетіне оптикалық диагностика зерттеу жұмыстары жасалды. Раман спектрлерінің нәтижелерінің көрсетуі бойынша екі жұмыс режимінде де үлгілер құрылымдық өзгерістерге ұшырағандығы анықталды. Тәжірибе барысында сонымен қатар графит пластиналарының беткі қабаты мыс материалынан тұратын пленкалармен қапталатындығы белгілі болды, ол ең алдымен доғалық разрядтың екі электродтар арасында жанғаннан кейін олардың тозаңдануымен және пайда болған мыс молекулаларының пластина бетіне отыруымен тікелей байланысты. Барлық алынған нәтижелер толығымен зерттелді, ТЯЭР нәтижелермен салыстырылды.

**Түйін сөздер:** импульстік плазмалық үдеткіш, ТЯЭР, кандидаттық материал.

#### Введение

На сегодняшний день эрозия защитных покрытий дивертора и первой стенки при нагрузках в пределах  $20 \text{ МВт/м}^2 - 10 \text{ ГВт/м}^2$  является, в частности, одной из нерешенных проблем в создании термоядерного реактора на основе токамака. Вследствие этого, особый интерес представляет выбор материалов обращенных к плазме и противостоящих плазменно-тепловому воздействию: нагреву поверхности до температуры кипения, плавления и сублимации [1-5].

Подвергнутые к эрозии материалы уменьшаются в толщине, ухудшаются их эксплуатационные характеристики. А также за счет эрозии происходит выброс атомарных (ионов, атомов, молекул, молекулярных кластеров) так и макроскопических частиц (пыль, осколки). Последнее сопровождается образованием трещин на поверхности (дефектов) и продуктов эрозии [6-12]. Продукты эрозии: пыли (частицы микронного размера) и наноструктурные образования могут привести к накоплению трития, в результате чего работа на реакторе становится небезопасным, также захват трития приводит к снижению его экономичности (1 гр трития стоит ~30 тыс. долл.). Опасность токсичности и радиоактивности пыли усугубляется ее летучестью [13-14]. Во-вторых, наноструктурные пленки развитой поверхностью представляют опасность при аварийных инцидентах, связан-

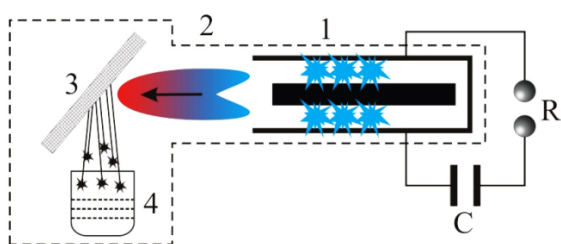
ных, в частности, с прорывами воды в камеру реактора, как катализатор для разложения воды и образования взрывоопасного количества водорода [15].

Данная работа посвящена исследованию процесса взаимодействия плазменного потока с кандидатным материалом – графитовой пластиной. Импульсная плазма была получена на экспериментальной установке ИПУ-30, собранной в лаборатории НИИЭТФ. В ходе работы также были анализированы морфологические и геометрические свойства поверхности графитовой мишени после воздействия на него импульсной плазмы.

#### Экспериментальная установка

Экспериментальная установка ИПУ-30 состоит из коаксиально расположенных электродов, разделенных между собой диэлектриком. Диаметр внутреннего электрода 55 мм, внешнего 108 мм, длина соответственно 330 мм и 350 мм, рисунок 1 [16-24].

К электродам установки прикладывается высокое напряжение от конденсаторных батарей, а в рабочей камере создается вакуум форвакуумным насосом. Высоковольтное напряжение на электроды подается с помощью разрядника (R). Разрядник представляет собой два круглых плоскопараллельных медных дисков, разделенных изолятором из фторопласта.



- 1) система электродов;
- 2) направленный импульсный плазменный поток;
- 3) мишень; 4) контейнер для сборки продуктов эрозии.

**Рисунок 1** – Принципиальная схема экспериментальной установки ИПУ-30

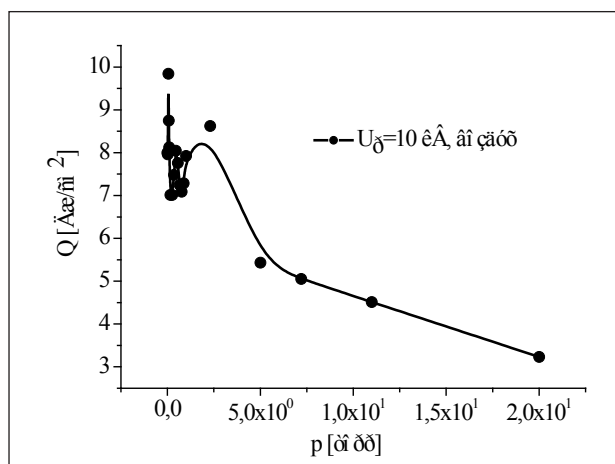
Графитовая пластина во время эксперимента располагалась в положении, как показано на рисунке 1.

### Плотность энергии импульсного плазменного потока

Основным механизмом эрозии материалов при их облучении потоком плазмы является тепловая нагрузка на поверхность, которая обусловлена энергозапасом плазменного сгустка, получаемого на ускорителе.

Для измерения плотности энергии импульсного плазменного потока был разработан и применен проволочный калориметр [25].

Результаты измерения плотности энергии плазменного потока проволочным калориметром при различных давлениях рабочего газа показаны на рисунке 2.



**Рисунок 2** – Зависимость плотности энергии плазмы от давления газа

Как видно из рисунка 2, плотность энергии плазмы с увеличением давления рабочего газа при фиксированном напряжении разряда сначала постепенно увеличивается, в некотором значении давления газа наблюдается максимум и с дальнейшим ростом уменьшается. Данная зависимость эквивалентна закону Пашена. То есть некоторому значению давления газа (когда известно межэлектродное расстояние) соответствует разрядное напряжение, при котором происходит максимальная ионизация газа. При таком случае плотность энергии плазмы тоже будет максимальной, что и показывает появление максимума на кривой зависимости 2. В данном случае большее энерговыделение происходит при 0,02 торр.

Чтобы удостовериться в корректности полученных данных, проволочный калориметр был откалиброван. В целях этого нами был поставлен следующий эксперимент: проволочный калориметр помещался в электрическую печь, и подогревался до температуры соответствующего температуре плазменного потока. Таким образом, в обоих случаях были сравнены показания изменения сопротивления проволочного калориметра. Соотношение, рассчитанное по формуле (1) показало, что чувствительность проволочного калориметра лежит в диапазоне 0,99-1.

$$\xi = \frac{\Delta R}{\Delta R_p} \quad (1)$$

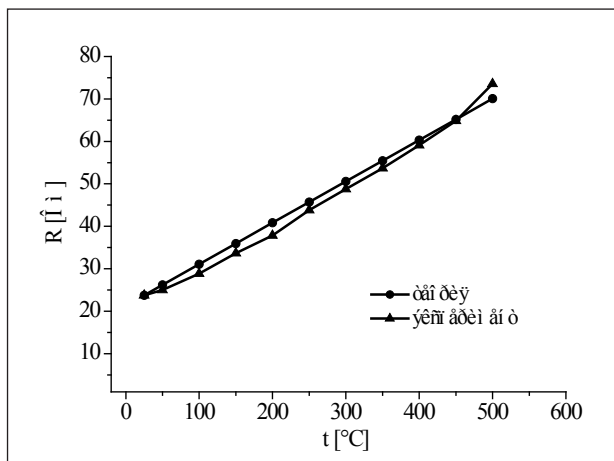
Также зависимость сопротивления калориметра от температуры в печи хорошо согласуется с теорией (рисунок 3), где используется классическое уравнение вида (2):

$$R_t = R_0 [1 + a(t - t_0)], \quad (2)$$

где  $R_0$  – сопротивление калориметра при комнатной температуре  $t_0$ ,  $a$  – температурный коэффициент сопротивления.

### Результаты анализа поверхностей графита

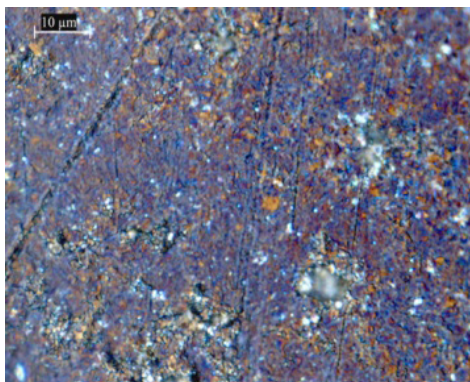
В экспериментах графитовые пластины были облучены 25 импульсами плазменного потока в двух различных напряжениях разряда: 5 кВ и 11 кВ. После обработки потоком плазмы модельные образцы защитного покрытия графита, показали различные результаты.



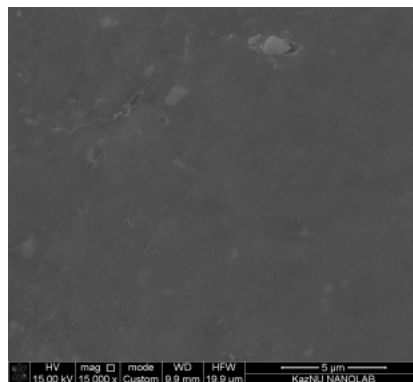
**Рисунок 3** – Зависимость сопротивления калориметра от температуры (теория и эксперимент)

СЭМ изображение и оптическая диагностика поверхности графитовой пластины при 5 кВ показаны на рисунке 4. Как можно увидеть на рисунке 4а, на поверхности графитовой пластины после воздействия на него высокотемпературной плазмы образовалась медная пленка. Также на рисунке 4б видно, что поверхность образца не подвергалась разрушению. Появление медной пленки обусловлено осаждением молекул меди, вырванных с поверхности электродов ускорителя во время разряда в межэлектродном пространстве. В данном случае установка работала в режиме «имплантация».

При напряжении разряда 11 кВ, поверхностный анализ графитовой пластины показал, что при таких больших тепловых нагрузках поверхность графита полностью «расплавляется» (рисунок 5).



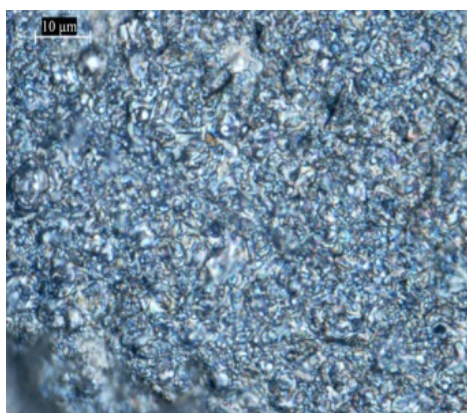
а)



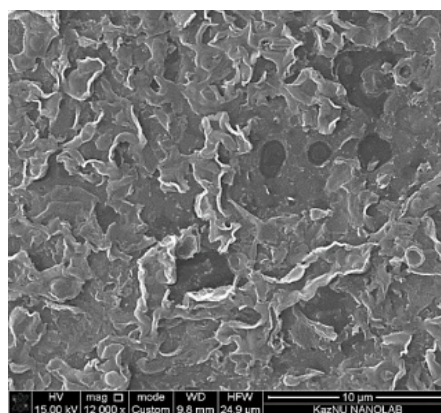
б)

а) Оптический и б) СЭМ изображения поверхности образца

**Рисунок 4** – Поверхность графитовой пластины, облученный 25 импульсами плазменного потока при 5 кВ



а)

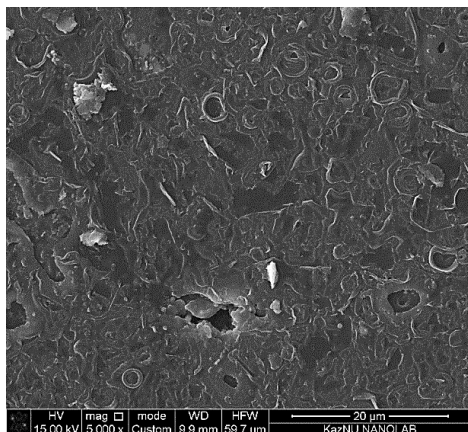


б)

а) Оптическая и б) СЭМ изображения поверхности образца

**Рисунок 5** – Поверхность графитовой пластины, облученный 25 импульсами плазменного потока при 11 кВ

Также наблюдается, что поверхность графитовой пластины не только подвергается к эрозии, но также на ее поверхности образуются блистеры (волдыри, пузыри) (рисунок 6).



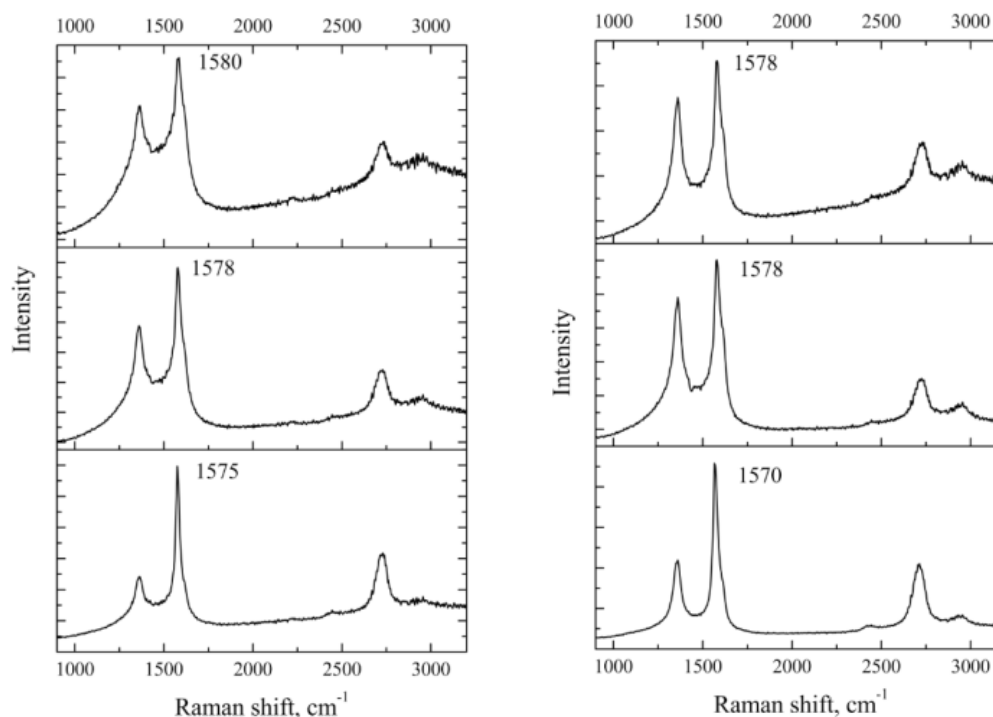
**Рисунок 6** – Эрозия и образование блистеров на поверхности исследуемой графитовой мишени при 11 кВ

Блистеры видны как белые кружки на рисунке 6. Предполагается, что причиной возникновения блистеров является имплантирование газа на поверхностный слой графита, в резуль-

тате чего на поверхности появляется высокое механическое напряжение, в конечном итоге это приводит к вздутию некоторых областей поверхностей графита. Также на рисунке 6 можно заметить кратера подобные следам небольшой глубины. Предполагается, что кратеры образуются в местах, где имеется большее скопление молекул газа. После взаимодействия с плазмой (за счет высокой температуры), происходит расширение газа, и в один момент, когда газ начинает выдавливать поверхность, поверхность разрушается, оставляя за собой следы микротрещин.

На рисунке 7 показаны Рамановские спектры графита после взаимодействия с плазменным потоком при напряжениях разряда 5 кВ и 11 кВ.

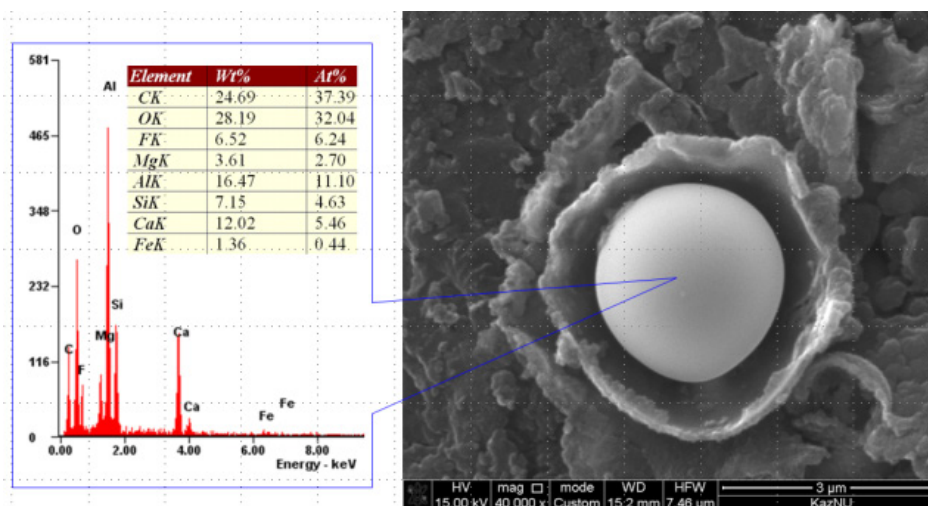
По Рамановскому спектру было выявлено, что образцы графита в обоих случаях имеют дефектную структуру. Однако, в первом случае, при 5 кВ (рисунок 7а) наблюдается уширение пиков и отношение интенсивности дефектного пика к графитовому  $I(D)/I(G)$  составляет в среднем 0,7. Это связано покрытием графитовой поверхности пленкой. Во втором случае, при 11 кВ (рисунок 7б) пики довольно узкие, т.е. сохраняется кристаллическая структура, однако вклад дефектов здесь значительный, что подтверждается соотношением  $I(D)/I(G)=0,85$



**Рисунок 7** – Раман спектр образцов показанные в рисунках 4 и 5: а) при 5 кВ, б) при 11 кВ

А также на поверхности графитовой пластины после взаимодействия с плазмой были обнаружены пылинки с диаметрами несколько мкм. Фотография и химический состав одного из таких пылинок показаны на рисунке 8. Было выявлено, что данная пылинка по своему химическому составу схоже с химическим составом материала, из которого сделан изолятор, находя-

щийся между электродами. Они образуются вследствие эрозии изолятора во время дугового разряда между электродами и ускоряются вместе с плазмой до больших скоростей. Максимальная скорость таких пылинок, обнаруженных нами, достигает, приблизительно 430 м/сек. Пылинки с такими скоростями способны разрушать поверхность мишени, как это показано на рисунке 8.



**Рисунок 8** – Химический спектр пылинки, образовавшегося во время эрозии изолятора между коаксиальными электродами при появлении дугового разряда и разрушение поверхности пылинкой

## Заключение

На первом исследуемом образце графита, при напряжении разряда 11 кВ обнаружались блистерные и кратерные образования по сравнению с напряжением разряда при 5 кВ. Доказательством тому являлись полученные в эксперименте микрофотографии графитовых поверхностей. По данным Рамановского спектра были определены интенсивности дефектного пика образцов в двух значениях напряжения

ускорителя: 5 кВ и 11 кВ. Для первого соотношение  $I(D)/I(G)$  составляет в среднем 0,7, для второго  $I(D)/I(G)=0,85$ . Выявлено, что пылинки с большими скоростями увлеченные импульсной плазмой способны разрушать поверхность графитовой мишени.

**Благодарность.** Работа была выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта ИРН AP05134671.

## Литература

- 1 ITER Physics Basis Editors. Chapter 1: Overview and summary // Nuclear Fusion. – 1999. – Vol.39. – P. 2137.
- 2 Flanagan J.C., Sertoli M., Bacharis M. et al. Characterising dust in JET with new ITER-like wall // Plasma physics and controlled fusion. – 2015. – Vol.57. – P. 014037.
- 3 Federici G., Skinner C.H. et al. Plasma-material interactions in current tokamaks and their implications for next step fusion reactors // Nuclear Fusion. – 2001. Vol.41. – P. 1967-1979.
- 4 Crauz V.I., Martinenko Yu.V., Svechnikov N.Yu., Smirnov V.P., Stankevich V.G., Khimchenko L.N. Nanosturctures in controlled fusion devices // Uspek. Phys. Nauk. – 2010. – Vol. 180. – P. 1055-1080.
- 5 Vignitchouk L., Tolia P. and Ratynskaia S. Dust-wall and dust-plasma interaction in the MIGRAINE code // Plasma Physics and Controlled Fusion. – 2014. – Vol.56. – P. 095005.

- 6 Ratynskaia S., Bergsaker H., Emmoth B., Litnovsky A., Kreter A. and Philipps V. Capture by aerogel—characterization of mobile dust in tokamak scrape-off layer plasmas // *Nucl. Fusion.* – 2009. – Vol.49. – P. 122001.
- 7 Pigarov A. Yu., Krashennnikov S.I., Soboleva T.K., Rognlien T.D. Dust–particle transport in tokamak edge plasmas // *Physics of Plasmas.* – 2005. – Vol.12. – P. 122508.
- 8 Sizyuk V. and Hassanein A. Kinetic Monte Carlo simulation of escaping core plasma particles to SOL for accurate response of plasma-facing components // *Nuclear Fusion.* – 2013. – Vol.53. – P.073023.
- 9 Utegenov A.U., Tazhen A.B., Dosbolayev M.K., Ramazanov T.S. Experimental investigation of the interaction of plasma flow with the wall of fusion reactor // 21st International symposium on Heavy Ion Inertial Fusion. Book of abstracts. – 2016. – P. 53.
- 10 Krauz V.I., Martynenko Yu.V., Sevchinkoav N.Yu., Smirnov V.P., Stankevich V.G., Khimchenko L.N. Nanostructures in controlled thermonuclear fusion facilities // *UFN.* – 2010. – Vol.180. – P.1055-1080.
- 11 Bartels H-W. et al. Accident Analysis Specifications for GSSR // Safety, Environment and Health Group. Garching ITER Joint Central Team. – 2000. – Vol.41. – P.11-14.
- 12 Shukla P.K. and Mamun A.A. Introduction to Dusty Plasma Physics // Series in Plasma Physics. – London: Institute of Physics Publishing. – 2002. – Vol.44. – P.123-165.
- 13 Klimov N.S., Podkovyrov V.L., Zhitluhin A.M., Arkhipov N.I., Safronov V.M., Barsuk V.A., Poznyak I.M., Loarte A., Merola M., Linke J. Effect of intense pulsed plasma flows on shielding materials of intracameral components of a fusion reactor // *Nuclear Physics and Engineering.* – 2010. – Vol.1. – P.210-219.
- 14 Bevelacqua J.J. Health physics considerations for the ITER // *International nuclear safety journal.* – 2014. – Vol.3. – P.25-52.
- 15 Martynenko Yu.V., Nagel M.Yu. Dust formation in TOKAMAK // *Thermonuclear fusion.* – 2009. – Vol.389. – P. 65-72.
- 16 Tong L., Hou L., Cao X. Study on hydrogen risk induced by dust for fusion device // *Journal of Fusion Energy.* – 2015. – Vol. 34. – P. 1-8.
- 17 Dosbolayev M.K., Utegenov A.U., Tazhen A.B., Ramazanov T.S. // *Laser and Particle Beams.* – 2017. – Vol.35. – P. 741-749.
- 18 Dosbolayev M.K., Utegenov A.U., Tazhen A.B., Ramazanov T.S., Gabdullin M.T. Dynamic properties of pulse plasma flow and dust formation in the pulsed plasma accelerator // *News of the Natnl. Acad.Sci. RK.* – 2016. – Vol.6. – P. 59–66.
- 19 Tazhen A.B., Utegenov A.U., Dosbolayev M.K., Ramazanov T.S., Kaikanov M.I. Definition of the density of energy of a pulsed plasma flow using a wire calorimeter // *J. PEOS.* – 2016. – Vol. 2. P. 40-44.
- 20 Tazhen A.B., Dosbolayev M.K., Ramazanov T.S. Diagnostics of pulsed plasma flow using Faraday cup // *Nuclear and Radiation Physics. Book of abstracts.* – 2015. – P. 84-85.
- 21 Tazhen A.B., Dosbolayev M.K., Raiymkhanov Zh., Ramazanov T.S. Diagnostics of pulsed plasma in accelerator ipu-30 // IX International Conference Plasma Physics and Plasma Technology. Book of abstracts. – 2018. – P. 304-307.
- 22 Tazhen A.B., Dosbolayev M.K., Utegenov A.U., Raiymkhanov Zh.R., Ramazanov T.S. Dust formation during the interaction of a pulsed plasma flow with ITER candidate wall materials // *ESCAMPIG XXIV Proceedings.* – 2018. – P. 146-147.
- 23 Dosbolayev M.K., Raiymkhanov Zh., Tazhen A.B., Utegenov A.U., Ramazanov T.S. Experimental Investigation of the Properties of Plasma-Dust Formations on Pulsed Plasma Accelerator // 15th Dusty Plasma Workshop. – 2018. – P.59.
- 24 Dosbolayev M.K., RaiymkhanovZh., Tazhen A.B., Utegenov A.U., Ramazanov T.S., Impulse Plasma Deposition of Carbon Nanoparticles // XII-th International Conference Ion Implantation and Other Applications of Ions and Electrons. Book of Abstracts. – 2018. – P. 82.
- 25 Tazhen A.B., Suleymenova A.Kh., Dosbolayev M.K., Ramazanov T.S. Determination of energy density of pulsed plasma flow using wire calorimeter // *J. PEOS.* – 2017. – Vol.19. – P. 510.

### References

- 1 ITER Physics Basis Editors. Chapter 1: Overview and summary // *Nuclear Fusion.* 39, 2137 (1999).
- 2 J.C. Flanagan, M. Sertoli, M. Bacharis et al., *Plasma physics and controlled fusion.* 57, 014037 (2015).
- 3 G. Federici, C.H. Skinner et al. *Nuclear Fusion.* 41, 1967-1979 (2001).
- 4 V.I. Crauz., Yu.V. Martinenko, N. Yu. Svechnikov, V.P. Smirnov, V.G. Stankevich, L.N. Khimchenko, *Uspekh. Phys. Nauk.*180, 1055-1080 (2010).
- 5 L. Vignitchouk, P. Talias and S. Ratynskaia, *Plasma Physics and Controlled Fusion.* 56, 095005 (2014).
- 6 S. Ratynskaia, H. Bergsaker, B. Emmoth, A. Litnovsky, A. Kreter and V. Philipps, *Nucl. Fusion.* 49, 122001 (2009).
- 7 Yu. Pigarov, S. I. Krashennnikov, T.K. Soboleva, T.D. Rognlien, *Physics of Plasmas.* 12, 122508 (2005).
- 8 V. Sizyuk and A. Hassanein, *Nuclear Fusion.* 53, 073023 (2013).
- 9 A.U. Utegenov, A.B. Tazhen, M.K. Dosbolayev, T.S. Ramazanov, 21st Intern. symposium on Heavy Ion Inertial Fusion, Book of abstracts. 53 (2016).
- 10 V.I. Krauz, Yu.V. Martynenko, N.Yu. Sevchinkoav, V.P. Smirnov, V.G. Stankevich, L.N. Khimchenko, *UFN,* 180, 1055-1080 (2010).
- 11 H-W. Bartels et al. Safety, Environment and Health Group, Garching ITER Joint Central Team. 41, 11-14 (2000).
- 12 P.K. Shukla and A.A. Mamun. Series in Plasma Physics. – London: Institute of Physics Publishing, 44, 123-165 (2002).
- 13 N.S. Klimov, V.L. Podkovyrov, A.M. Zhitluhin, N.I. Arkhipov, V.M. Safronov., V.A. Barsuk, I.M. Poznyak, A. Loarte, M. Merola, J. Linke, *Nuclear Physics and Engineering,* 1, 210-219 (2010).
- 14 J.J. Bevelacqua Health physics considerations for the ITER // *International nuclear safety journal,* 3, 25-52 (2014).
- 15 Yu.V. Martynenko, M.Yu. Nagel, *Thermonuclear fusion.* 389, 65-72 (2009).

- 16 Tong L., Hou L., Cao X. *Journal of Fusion Energy*, 34, 1-8 (2015).
- 17 M.K. Dosbolayev, A.U. Utegenov, A.B. Tazhen, T.S. Ramazanov, *Laser and Particle Beams*. 35, 741-749 (2017).
- 18 M.K. Dosbolayev, A.U. Utegenov, A.B. Tazhen, T.S. Ramazanov, M.T. Gabdullin, *News of the Natnl. Acad.Sci. RK*. 6, 59–66 (2016).
- 19 A.B. Tazhen, A.U. Utegenov, M.K. Dosbolayev, T.S. Ramazanov, M.I. Kaikanov, A.V., *J. PEOS*. 2, 40-44 (2016).
- 20 A.B. Tazhen, M.K. Dosbolayev, T.S. Ramazanov, *Nuclear and Radiation Physics, Book of abstracts*, 84-85 (2015).
- 21 A.B. Tazhen, M.K. Dosbolayev, Zh. Raiymkhanov, T.S. Ramazanov, *IX Intern. Conf. Plasma Physics and Plasma Technology2 Book of abstracts2* 304-307 (2018).
- 22 A.B. Tazhen, M.K. Dosbolayev, A.U. Utegenov, Zh.R. Raiymkhanov, T.S. Ramazanov, *ESCAMPIG XXIV Proc.*, 146-147 (2018).
- 23 M.K. Dosbolayev, Zh. Raiymkhanov, A.B. Tazhen, A.U. Utegenov, T.S. Ramazanov, *15th Dusty Plasma Workshop*, 59 (2018).
- 24 M.K. Dosbolayev, Zh. Raiymkhanov, A.B. Tazhen, A.U. Utegenov, T.S. Ramazanov, *XII-th Intern. Conf. Ion Implantation and Other Applications of Ions and Electrons, Book of Abstracts*, 82 (2018).
- 25 A.B. Tazhen, A.Kh. Suleymenova, M.K. Dosbolayev, T.S. Ramazanov, *J. PEOS*. 19, 510 (2017).



3-бөлім  
**КОНДЕНСИРЛЕНГЕН КҮЙ ФИЗИКАСЫ  
ЖӘНЕ МАТЕРИАЛТАНУ ПРОБЛЕМАЛАРЫ.  
НАНОҒЫЛЫМ**

---

Section 3  
**CONDENSED MATTER PHYSICS AND  
MATERIALS SCIENCE PROBLEMS.  
NANOSCIENCE**

---

Раздел 3  
**ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ  
И ПРОБЛЕМЫ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ.  
НАНОНАУКА**

**Kenzhina I.<sup>1,2\*</sup>, Kozlovskiy A.<sup>1,2</sup>, Kadyrzhanov K.K.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>The Institute of Nuclear Physics of Republic of Kazakhstan, Kazakhstan, Astana

<sup>2</sup>L.N. Gumilyov Eurasian National University, Kazakhstan, Astana

\*e-mail: kenzhina@physics.kz

## **STUDY OF STRUCTURAL PROPERTIES OF COPPER NANOTUBES MODIFIED WITH IONIZING RADIATION**

In modern materials science, irradiation with electron beams and a  $\gamma$  ray flux of metallic nanostructures is an effective tool for stimulating a controlled modification of structural and conductive properties of materials. The paper presents the results of the influence of various types of irradiation on structural and conductive properties of copper nanotubes obtained by electrochemical synthesis in pores of template matrices based on polyethylene terephthalate. The modification of properties of synthesized Cu-nanotubes was carried out at ELV-4 linear accelerator (Kurchatov, Kazakhstan) by irradiating with electrons flux of 5 MeV energies and  $\gamma$  quanta with of 1.35 MeV energy, doses of 50-250 kGy in 50 kGy increments. SEM, XRD and EDS methods established that irradiation with an electron beam and  $\gamma$  rays with doses of 50 and 100 kGy allows us modifying the crystal structure of nanotubes, increasing their conductivity and decreasing their resistance without destroying their structure. An increase in the irradiation dose leads either to an insignificant change in conductive properties for high-energy electrons and  $\gamma$  quanta, or to a deterioration of conductive properties due to the appearance of oxide compounds in the crystal structure and subsequent destruction of samples.

**Key words:** template synthesis, ion-track technology, electrochemical deposition, nanotubes, nanostructures, growth mechanisms, radiation defects.

Кенжина И.<sup>1,2\*</sup>, Козловский А.<sup>1,2</sup>, Қадыржанов Қ.Қ.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Ядролық физика Институтының филиалы, Қазақстан, Астана қ.

<sup>2</sup>Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Қазақстан, Астана қ.

\*e-mail: kenzhina@physics.kz

### **Иондаушы сәулелену арқылы модификацияланған мыс нанотүтікшелердің құрылымдық қасиеттерін зерттеу**

Заманауи материалтану, металдық нанокұрылымдардың электрондық шоқтармен сәулелену және гамма-сәулелену ағынымен материалдардың құрылымдық және өткізгіш қасиеттерінің реттелетін түрлендірілуін ынталандырудың тиімді құралы болып табылады. Мақалада полиэтилентерефталат негізінде темплат матрицалардағы электрохимиялық синтез арқылы алынатын мыс нанотүтікшелердің құрылымдық және өткізгіш қасиеттеріне әртүрлі сәулеленудің әсер етуін зерттеу нәтижелері келтірілген. Синтезделген Cu-нанотүтікшелердің қасиеттерін 50 кГр-дегі 50-250 кГр сәулелену мөлшермен, 1.35 МэВ қуатпен  $\gamma$ -кванттармен және 5 МэВ энергиясы бар қуатпен электрондардың ағынымен сәулелену арқылы ЭЛВ-4 сызықты үдеткіште (Курчатов, Қазақстан) жүргізілді. РЭМ, РҚТ және ЭДТ әдістері электрондардың ағынмен және 50 және 100 кГр мөлшері бар гамма кванттармен сәулеленуді нанотүтікшелердің кристалды құрылымын өзгертуге, өткізгіштігін арттыруға және құрылымын бұзбай нанокұрылымдардың кедергісін төмендетуге мүмкіндік береді. Сәулелену дозасының жоғарылауы жоғары энергиялық электрондар мен гамма-квантар үшін өткізгіш қасиеттердің шамалы өзгеруіне немесе кристалдық

құрылымда оксид қосылыстарының пайда болуына және үлгілердің кейінгі бұзылуына байланысты өткізгіш қасиеттердің нашарлауына әкеп соғады.

**Түйін сөздер:** үлгілі синтездеу, ион-трек технологиясы, электрохимиялық тұндыру, нанотүтікшелер, наноқұрылымдар, өсу механизмдері, радиациялық ақаулар.

Кенжина И.<sup>1,2\*</sup>, Козловский А.<sup>1,2</sup>, Кадыржанов К.К.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Астанинский филиал Института ядерной физики, Казахстан, г. Астана

<sup>2</sup>Евразийский национальный университет им. Л.Н.Гумилева, Казахстан, г. Астана

\*e-mail: kenzhina@physics.kz

### Изучение структурных свойств медных нанотрубок, модифицированных ионизирующим излучением

В современном материаловедении облучение электронными пучками и потоком гамма квантов металлических наноструктур является эффективным инструментом для стимулирования контролируемой модификации структурных и проводящих свойств материалов. В работе представлены результаты исследований влияния различного вида излучений на структурные и проводящие свойства медных нанотрубок, полученных методом электрохимического синтеза в порах темплатных матриц на основе полиэтилентерефталата. Модификация свойств синтезированных Си-нанотрубок проводилась на линейном ускорителе ЭЛВ-4 (Курчатов, Казахстан) путем облучения потоком электронов с энергией 5 МэВ и  $\gamma$ -квантами с энергией 1.35 МэВ, дозами 50–250 кГр в 50 кГр. Методами РЭМ, РСА и ЭДА установлено, что облучение потоком электронов и гамма квантами с дозами 50 и 100 кГр позволяет модифицировать кристаллическую структуру нанотрубок, увеличивая проводимость и снижая сопротивление наноструктур, не разрушая их структуру. Увеличение дозы облучения приводит либо к незначительному изменению проводящих свойств для высокоэнергетичных электронов и гамма квантов, либо к ухудшению проводящих свойств за счет появления оксидных соединений в кристаллической структуре и последующей деструкции образцов.

**Ключевые слова:** шаблонный синтез, ионно-трековая технология, электрохимическое осаждение, нанотрубки, наноструктуры, механизмы роста, радиационные дефекты.

## Introduction

One of the interesting objects of research in modern materials science is metal nanostructures, which are promising for the production of various electronic sensors with unique properties, recording instruments, creating composite materials, etc. Obtaining such nanostructures on a large scale is one of the key moments in the creation of a whole range of modern nanotechnologies [1-3]. Among all metal nanomaterials, copper is one of the most actual, cause copper nanostructures have high electrical conductivity and has an important role in the development of sensors for electronics [4], and can also be used as catalysts [5]. The possibility of controlled regulation of physical and chemical properties of nanostructures [6-12] contributes to the expansion of their use field. At the same time, the stability of physical and structural properties of nanomaterials is the basis for determining the reliability of devices. One of the ways to change the physical-chemical properties of nanostructured materials is radiation modification. The changes in structural properties of nanomaterials initiated by radiation defects often make their practical use difficult.

At the same time, the formation of radiation defects in metallic nanostructures, especially in combination with other influences (change in temperature, mechanical loading, electric field), allows the directional modification of nanomaterials properties [13-17]. The energy losses of incident ions on electron shells can affect the weakening of ionic motion, the suppression or enhancement of defects formation and their further evolution. Ion modification of nanomaterials is a tool for creating kinetically stable non-equilibrium defects and metastable phases. This allows us to investigate the behaviour and properties of nanostructures far from equilibrium [18-21]. Conducting properties of copper nanostructures can be promising for applications in conditions of external irradiation, for example, in space. Therefore, the study of their radiation resistance, the stability of properties under irradiation and the ability to modify properties by irradiation with fast electrons or gamma quanta becomes a very urgent problem. In this connection, it is essential to study the effect of ionizing radiation, mainly, the flow of low-energy and high-energy electrons, as well as  $\gamma$  quanta, on structural and conductive properties of copper nanotubes.

The purpose of this work is to investigate dynamics of changes in structural and conductive properties of Cu nanotubes under various types of ionizing radiation.

### Experimental part

*Preparation of polymer templates.* Track membranes were prepared of «Hostaphan®» brand polyethylene terephthalate produced by Mitsubishi Polyester Film (Germany). The films were treated at the “DC-60” accelerator of heavy ions (Kazakhstan) by krypton ions with an energy of 1.75 MeV/nucleon and a fluence of  $4 \times 10^7$  ion/cm<sup>2</sup> [22, 23]. The membranes were etched according to the standard two-sided etching technique in a solution of 2.2 M NaOH at  $85 \pm 1$  °C. The pore size according to SEM and gas porosimetry was  $380 \pm 10$  nm [24].

*Electrochemical synthesis of copper in channels of nanoporous PET TM.* Electrochemical synthesis in tracks of the template was carried out in the potentiostatic mode at a voltage of 1.0 V. Electrolyte solution consists of  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  (238 g/l),  $\text{H}_2\text{SO}_4$  (21 g/l). The yield of copper in current from sulfuric acid solutions of electrolytes is 100% [25]. The growth of nanostructures was monitored by the chronoamperometry method with the “Agilent 34410A” multimeter. Using magnetron sputtering in vacuum, a layer of gold with a thickness of no more than 10 nm was deposited on one side of the template PET matrix, which later appeared as a working electrode (cathode) during electrochemical deposition.

*Investigation of the structure and properties of Cu nanotubes.* Investigation of structural characteristics and elemental composition of obtained nanotubes before and after irradiation was carried out using a scanning electron microscope “Hitachi TM3030” with a microanalysis system “Bruker XFlash MIN SVE” at an accelerating voltage of 15 kV. X-ray diffraction (XRD) analysis was obtained on a D8 ADVANCE ECO diffractometer (Bruker, Germany) using  $\text{CuK}\alpha$  radiation. In order to determine the phases and study the crystal structure, the software Bruker AXSDIFFRAC.EVA v.4.2 and the international ICDD PDF-2 database were used.

*Modification of structural and conductive properties of Cu nanotubes.* The modification of properties of synthesized Cu-nanotubes was carried out at ELV-4a linear accelerator (Kurchatov, Kazakhstan) by irradiating with electrons flux of 5 MeV energies and  $\gamma$  quanta with of 1.35 MeV energy, doses of 50-250 kGy in 50 kGy increments.

### Results and discussion

Figure 1 shows SEM images obtained initial samples. Analysis of electron images showed that the synthesized nanostructures are hollow nanotubes whose height coincides with the thickness of template matrix of 12  $\mu\text{m}$ . The diameter of nanotubes corresponds to pore diameters of  $380 \pm 10$  nm.

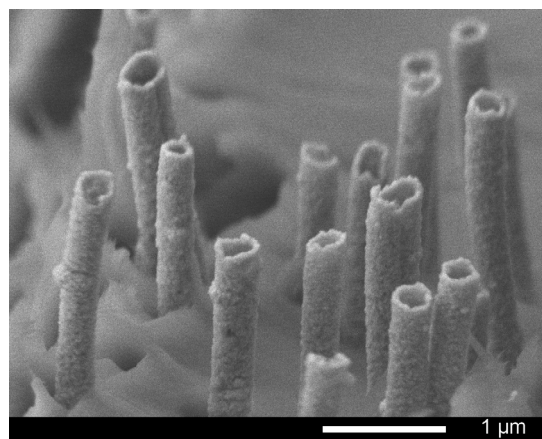
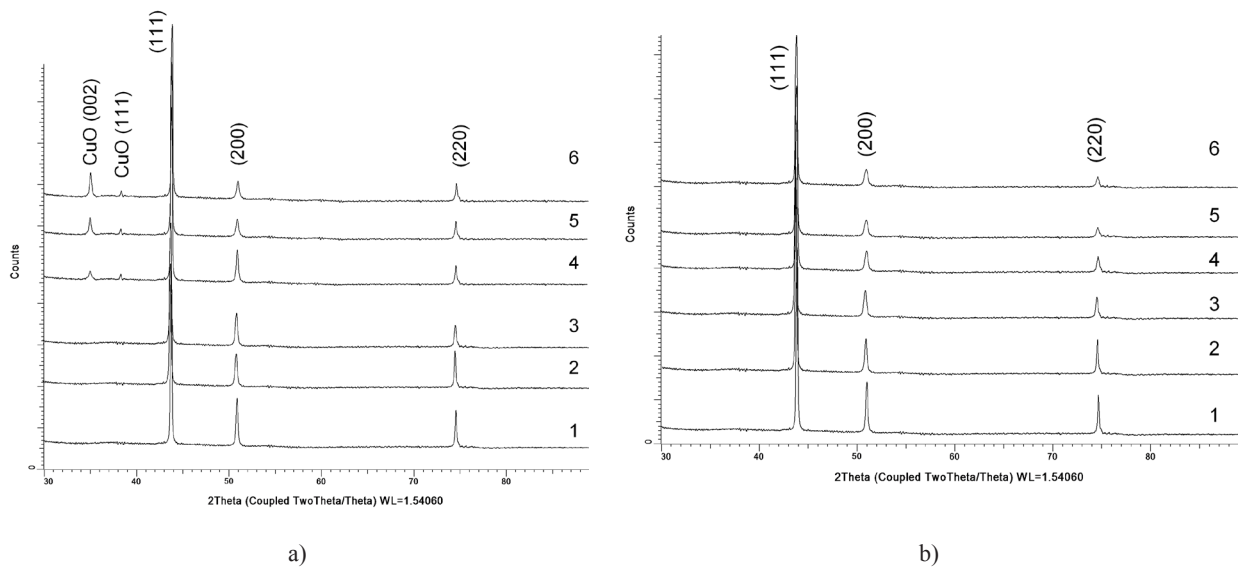


Figure 1 – SEM images of nanotubes

According to EDS data, the obtained nanotubes as a result of electrochemical synthesis are 100% copper, and no peaks characteristic of oxygen were detected. Figure 2 shows XRD patterns of investigated samples before and after irradiation. The type of diffraction patterns of investigated samples is characteristic for polycrystalline nanoscale structures. Analysis of the initial sample diffractogram made it possible to establish that the initial copper nanotubes possess a polycrystalline structure with a fcc phase without the presence of oxide compounds in the structure. According to the XRD data, the unit cell is characterized by a cubic syngony (Fm3m (225)) with a cell parameter  $a=3.6130$ , different from the reference value ( $a = 3.6150$ , PDF#040836). The difference in the value of the unit cell parameter from the reference value can be caused by microstresses that arise in the structure during the synthesis. When the lines on the diffractogram were approximated by the necessary number of symmetric pseudo-Voigt functions, the width of registered lines at half their height (FWHM) was measured, which allowed characterizing the perfection of the crystal structure and the degree of crystallinity. As a result of the treatment, it was found that the crystallinity of initial sample was 84%.



**Figure 2** – XRD patterns of Cu nanotubes irradiated by an electron beam with 5 MeV energy (a), (b)  $\gamma$  quanta: 1 – initial, 2 – 50 kGy, 3 – 100 kGy, 4 – 150 kGy, 5 – 200 kGy, 6 – 250 kGy

Analysis of XRD diffractograms of Cu nanotubes irradiated by 5 MeV electron beam, shown in Figure 2a, made it possible to estimate the change in the crystal structure under irradiation. As the irradiation dose is increased, the intensity and peaks shape are changed. That can be caused by a decrease in microstresses contribution to the crystal structure as a result of electron annealing of defects. At the increase in the irradiation dose above 100 kGy, XRD patterns show the appearance of peaks characteristic for copper oxide CuO with Miller (002) and (111) indices. The presence of oxide compounds in nanotubes structure can be caused by the appearance of local heating regions in the crystal structure during the interaction of electrons with nanotubes. Table 1 presents results of the change in the phase state of Cu nanotubes as a result of irradiation with various types of radiation.

**Table 1** – Data of phase state changes

Absorbed dose, kGy	e, 5 MeV		$\gamma$ -rays	
	Cu	CuO	Cu	CuO
0	100	0	100	0
50	100	0	100	0
100	100	0	100	0
150	97	3	100	0
200	97	3	100	0
250	96	4	100	0

As can be seen from Table 1, irradiation with low-energy electrons leads to a change in the phase state of copper nanotubes due to the formation of a CuO oxide compound in the crystal structure. At the same time, at high irradiation doses, a sharp increase in the contribution of oxide phase to the crystal structure is observed. Oxide phase formation can be explained by the local heating of the crystal structure. It is conditioned by the energy losses of electrons in interaction with the crystal lattice of nanotubes. According to the theory, when electrons or ions interact with high energy with the crystal lattice of nanostructures, only a small part of incident particles energy is transmitted to it. In this connection, a small number of additional charge carriers or structural defects arise in nanoscale structures [26, 27]. Moreover, as the energy of incident particles decreases, the number of charge carriers and defects created increases according to the increase in the linear energy transfer and the increase in the cross section for interaction with crystal lattice atoms. But in conventional materials the total number of charge carriers and structure defects decreases with decreasing energy of incident particles.

However, when  $\gamma$  rays of Cu nanotubes are irradiated, according to XRD diffractograms, the appearance of oxide compounds in the structure is not observed (Figure 2b). A feature of  $\gamma$  quanta during passage through a substance is that they collide relatively rarely with electrons and nuclei. But in a collision, as a rule, they sharply deviate from their

path, i.e. practically drop out of the beam. Additionally, they have a zero rest mass and, therefore, cannot have a velocity different from the speed of light. This means that the  $\gamma$  quanta in the medium can not slow down: they are either absorbed or scattered, mainly at large angles. For  $\gamma$ -quanta, there is no concept of the path, the maximum range, the energy loss per unit length. As a result of the interaction of  $\gamma$  quanta with the crystal structure, a change in peaks intensity is observed. This leads to a change in the degree of crystallinity and main parameters of the crystal structure. Figure 4a is a graph of dependence of the change in the unit cell parameter from the irradiation dose.

The change in the unit cell parameter, an increase in the parameter is observed with increasing irradiation dose. The greatest increase is observed for samples irradiated by low-energy electrons. For samples irradiated with electrons with energies of 5 MeV and  $\gamma$  quanta, the parameter  $a$  is increased by 0.12% and 0.15% for electrons and  $\gamma$  quanta, respectively. According to calculations, when irra-

diation with electrons with an energy of 5 MeV and  $\gamma$  quanta, an increase in the degree of crystallinity is observed, which is due to a change in the crystal lattice. The appearance of oxide compounds in a structure of less than 10% leads to a decrease in the degree of crystallinity. For samples irradiated with low-energy electrons, the change in the degree of crystallinity consists of two stages.

Determination of dynamics of the change in texture planes and the orientation of Cu nanotubes as a result of irradiation was carried out by calculating the texture coefficients using the Harris equation (Table 2).

$$C_{hkl} = \frac{I_{hkl}}{I_{0hkl}} \bigg/ \frac{1}{n} \sum \frac{I_{hkl}}{I_{0hkl}},$$

where  $I_{hkl}$  is the experimentally obtained intensity of the reflex,  $I_{0hkl}$  is the corresponding intensity according to the JCPDS database, and  $n$  is the number of reflexes.

**Table 2** – Values of texture coefficients

Dose, kGy	e, 5 MeV			$\gamma$ -rays		
	111	200	220	111	200	220
0	1.5849	0.8263	1.1456	1.5849	0.8263	1.1456
50	1.6301	0.7311	1.0312	1.7109	0.7835	1.0217
100	1.7507	0.5427	0.9317	1.7345	0.6913	0.9215
150	1.7509	0.5481	0.9137	1.7431	0.6904	0.9119
200	1.7511	0.5391	0.9091	1.7449	0.6834	0.9124
250	1.7502	0.5399	0.9017	1.7356	0.6824	0.9074

Texture coefficients more than one point to the predominant orientation of nanotubes arrays along the corresponding directions, which indicates an increase in the number of grains along these directions. The TC (hkl) values of the initial sample of Cu-nanotubes confirm the assumption of a polycrystalline structure with the dominant direction [111]. At the same time, with an increase in the irradiation dose, a reorientation of the crystal structure is observed for the samples irradiated by the electron beam with an energy of 5 MeV and  $\gamma$  quanta.

For samples irradiated with a low-energy electron flux, a maximum decrease in the resistivity at a dose of 100 kGy is observed. With an increase in the irradiation dose, a sharp increase in the resistance is observed, which is due to local thermal heating

of nanotubes, which leads to the destruction of the crystal lattice and samples amorphization.

## Conclusion

The dependence of the change in structural and conductive properties of Cu nanotubes from irradiation with various types of ionizing radiation was established. The dynamics of changes in structural and conductive properties as a function of irradiation dose using SEM, XRD, and EDS was studied in detail.

It is established that irradiation with an electron beam and  $\gamma$  rays with doses of 50 and 100 kGy allows us modifying the crystal structure of nanotubes, increasing their conductivity, but not destroying

their structure. An increase in the irradiation dose leads either to an insignificant change in conductive properties for high-energy electrons and  $\gamma$  quanta, or to a deterioration of conducting properties due to the appearance of oxide compounds in the crystal structure and subsequent destruction of samples.

### References

- 1 Hsiao J. C., Fong K. Making big money from small technology //Nature. – 2004. – Vol. 428. – №. 6979. –P. 218.
- 2 Lu W., Lieber C. M. Nanoelectronics from the bottom up //Nanoscience And Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals. – 2010. – Vol. 137-146.
- 3 Natelson D. Nanofabrication: Best of both worlds //Nature materials. – 2006. – Vol. 5. – №. 11. – P. 853.
- 4 Lu L., Sui M. L., Lu K. Superplastic extensibility of nanocrystalline copper at room temperature //Science. – 2000. – Vol. 287. – №. 5457. – P. 1463-1466.
- 5 Eastman J. A. et al. Anomalously increased effective thermal conductivities of ethylene glycol-based nanofluids containing copper nanoparticles //Applied physics letters. – 2001. – Vol. 78. – №. 6. – P. 718-720.
- 6 Lisiecki I., Pileni M. P. Synthesis of copper metallic clusters using reverse micelles as microreactors //Journal of the American Chemical Society. – 1993. – Vol. 115. – №. 10. – P. 3887-3896.
- 7 Filankembo A. et al. Is the anion the major parameter in the shape control of nanocrystals? //The Journal of Physical Chemistry B. – 2003. – Vol. 107. – №. 30. – P. 7492-7500.
- 8 Lisiecki I. et al. Structural investigations of copper nanorods by high-resolution TEM //Physical Review B. – 2000. – Vol. 61. – №. 7. – P. 4968.
- 9 Ngo A. T., Pileni M. P. Assemblies of cigar-shaped ferrite nanocrystals: orientation of the easy magnetization axes //Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2003. – Vol. 228. – №. 1-3. – P. 107-117.
- 10 Pinna N. et al. Triangular CdS nanocrystals: synthesis, characterization, and stability //Langmuir. – 2001. – Vol. 17. – №. 26. – P. 7982-798
- 11 Salzemann C. et al. Characterization and growth process of copper nanodisks //Advanced Functional Materials. – 2005. – Vol. 15. – №. 8. – P. 1277-1284.
- 12 Yen M. Y. et al. Synthesis of Cable Like Copper Nanowires //Advanced Materials. – 2003. – Vol. 15. – №. 3. – P. 235-237.
- 13 Liu Z., Bando Y. A novel method for preparing copper nanorods and nanowires //Advanced Materials. – 2003. – Vol. 15. – №. 4. – P. 303-305.
- 14 Reichenberger M. A. et al. Monte Carlo simulation of random, porous (foam) structures for neutron detection //Radiation Physics and Chemistry. – 2017. – Vol. 130. – P. 186-195.
- 15 Kaur A., Chauhan R. P. Carbon ion beam-induced variation in orientation of crystal planes of polycrystalline Zn nanowires //Radiation Effects and Defects in Solids. – 2014. – Vol. 169. – №. 6. – P. 513-521.
- 16 Smith C. L. et al. The effects of gold nanoparticles concentrations and beam quality/LET on dose enhancement when irradiated with X-rays and protons using alanine/EPR dosimetry //Radiation Measurements. – 2017. – Vol. 106. – P. 352-356.
- 17 Zhao Y. et al. Photothermal effect on Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> nanoparticles irradiated by white-light for energy-efficient window applications //Solar Energy Materials and Solar Cells. – 2017. – Vol. 161. – P. 247-254.
- 18 Wang J. G., Tian M. L. TEM investigation of Zn/ZnO nanowires with different microstructure synthesized by electrodeposition //Microscopy and Microanalysis. – 2004. – Vol. 10. – №. S02. – P. 358-359.
- 19 Deiss E., Holzer F., Haas O. Modeling of an electrically rechargeable alkaline Zn–air battery //Electrochimica Acta. – 2002. – Vol. 47. – №. 25. – P. 3995-4010.
- 20 Wang J. G. et al. Controllable template synthesis of superconducting Zn nanowires with different microstructures by electrochemical deposition //Nano letters. – 2005. – Vol. 5. – №. 7. – P. 1247-1253.
- 21 Heremans J. P. et al. Resistance, magnetoresistance, and thermopower of zinc nanowire composites //Physical review letters. – 2003. – Vol. 91. – №. 7. – P. 076804.
- 22 Kaniukov E. et al. Growth mechanisms of spatially separated copper dendrites in pores of a SiO<sub>2</sub> template //Philosophical Magazine. – 2017. – Vol. 97. – №. 26. – P. 2268-2283.
- 23 Zdorovets M. et al. Accelerator complex based on DC-60 cyclotron //Proc. 24th Russian Particle Accelerator Conf. – 2014. – P. 287-289.
- 24 Kaniukov E. Y. et al. Evolution of the polyethylene terephthalate track membranes parameters at the etching process //Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences). – 2017. – Vol. 52. – №. 2. – P. 155-160.
- 25 Kaniukov E. et al. Tunable synthesis of copper nanotubes //IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2016. – Vol. 110. – №. 1. – P. 012013.
- 26 Li W. et al. Modulating the threshold voltage of oxide nanowire field-effect transistors by a Ga<sup>+</sup> ion beam //Nano Research. – 2014. – Vol. 7. – №. 11. – P. 1691-1698.
- 27 Tuboltsev V., Räisänen J. Sculpturing nanowires with ion beams //Small. – 2009. – Vol. 5. – №. 23. – P. 2687-2691.

### References

- 1 J.C. Hsiao, *Nature* 428(6979), 218 (2004).
- 2 Lu Wei, *Nature materials* 6.11, 841 (2007).
- 3 D. Natelson, *Nature materials* 5.11,853 (2006).
- 4 Lu Lian, *Science* 287.5457, 1463-1466 (2000).
- 5 J.A. Eastman, *Applied physics letters* 78.6, 718-720, (2001).
- 6 Lisiecki, *Journal of the American Chemical Society* 115.10, 3887-3896 (1993).
- 7 Filankembo, *Physical Chemistry B* 107.30, 7492-7500 (2003).
- 8 Lisiecki, *Physical Review B* 61.7, 4968 (2000).
- 9 A.T. Ngo, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 228.1-3, 107-117 (2003).
- 10 N. Pinna, *Langmuir* 17.26, 7982-7987 (2001).
- 11 Salzemann, *Advanced Functional Materials* 15.8, 1277-1284 (2005).
- 12 M.-Y. Yen, *Advanced Materials* 15.3, 235-237 (2003).
- 13 L. Zongwen, *Advanced Materials* 15.4, 303-305 (2003).
- 14 M.A. Reichenberger, *Radiation Physics and Chemistry* 130, 186-195 (2017).
- 15 Kaur, *Radiation Effects and Defects in Solids* 169.6, 513-521 (2014).
- 16 C.L. Smith, *Radiation Measurements* 106, 352-356 (2017).
- 17 Z. Yuan, *Solar Energy Materials and Solar Cells* 161, 247-254 (2017).
- 18 J.G. Wang, *Microscopy and Microanalysis* 10.S02, 358 (2004).
- 19 E.F. Deiss, *Electrochimica acta* 47.25, 3995-4010 (2002). PII: S0013 – 4686(02)00316-X
- 20 J.G. Wang, *Nano letters* 5.7, 1247-1253 (2005).
- 21 J.P. Heremans, *Physical review letters* 91.7, 076804 (2003).
- 22 E. Kaniukov, *Philosophical Magazine* 97.26, 2268-2283 (2017).
- 23 M. Zdorovets, *Proc. 24th Russian Particle Accelerator Conf.* 287-289, (2014). ISBN 978-3-95450-170-0
- 24 E. Yu. Kaniukov, *Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences)* 52.2, 155-160 (2017).
- 25 E.Yu. Kaniukov, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering.* 110.1, 012013 (2016).
- 26 W. Li, *Nano Research* 7.11, 1691-1698 (2014).
- 27 V. Tuboltsev, *Small* 5.23, 2687-2691 (2009).



**Жантуаров С.Р.<sup>1,2\*</sup>, Жолдыбаев К.С.<sup>1,2</sup>, Алдияров А.У.<sup>3</sup>,  
Мухамедшина Д.М.<sup>1</sup>, Токмолдин Н.С.<sup>1,3</sup>, Карни М.Дж.<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>ТОО Физико-технический институт, Казахстан, г. Алматы

<sup>2</sup>Сатпаев Университет (бывш. КазНИТУ им. К.И.Сатпаева), Казахстан, г. Алматы

<sup>3</sup>Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы

<sup>4</sup>Университет Суонси, Великобритания, г. Суонси

\*e-mail: sultzhantuarov@mail.ru

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ**

Данная работа посвящена теоретическому изучению перовскитных солнечных элементов. Перовскитные солнечные элементы, состоящие из свинцово-галлоидных метил-аммониевых соединений, привлекают к себе внимание своей высокой эффективностью и потенциально низкой стоимостью изготовления. Сочетание данных двух факторов позволяет в перспективе получать высокопроизводительные солнечные батареи на их основе, которые по себестоимости будут ниже применяемых сегодня производственных образцов фотоэлементов, при сопоставимых с ними показателях эффективности. С помощью программы AFORS-HET-1D было проведено моделирование перовскитного фотоэлектрического преобразователя. Была получена модель данного преобразователя, определены значения параметров цепи, характеризующих эффективность: напряжение холостого хода, ток короткого замыкания, фактор заполнения. В ходе моделирования определено влияние толщины слоев, составляющих солнечный элемент, на производительность и квантовую эффективность. Также были проведены работы по оптимизации фотоэлемента для выявления потенциала дальнейшего роста его эффективности. После оптимизации была получена модель на основе перовскитов с эффективностью равной 17%.

**Ключевые слова:** перовскит, солнечный элемент, моделирование, программа AFORS-HET-1D, фотовольтаика.

Zhantuarov S.R.<sup>1,2</sup>, Zholdybaev K.S.<sup>1,2</sup>, Aldiyarov A.U.<sup>3</sup>,  
Muchamedshina D.M.<sup>1</sup>, Tokmoldin N.S.<sup>1,3</sup>, Carnie M.J.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty

<sup>2</sup>Satbaev University, Kazakhstan, Almaty

<sup>3</sup>Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty

<sup>4</sup>Swansea University, UK, Swansea

\*e-mail: sultzhantuarov@mail.ru

### **Modeling of perovskite solar cells**

This paper is devoted to the theoretical study of perovskite solar cells. Perovskite solar cells consisting of lead-halide methyl ammonium compounds attract attention with their high efficiency and potentially low manufacturing cost. The combination of these two factors makes it possible in the future to obtain high-performance solar cells based on them, which at cost will be lower than the production samples of photovoltaic cells used today, with comparable performance indicators. A perovskite photoelectric converter was simulated by AFORS-HET-1D program. A model of this converter was obtained, the values of the circuit parameters characterizing the efficiency were determined: no-load voltage, short-circuit current, filling factor. During the simulation, the effect of the thickness of the layers that make up the solar cell on the performance and quantum efficiency was determined. Work was also carried out to

optimize this photocell to identify the potential for further growth of its efficiency. After optimization, a perovskite-based model was obtained with an efficiency of 17%.

**Key words:** perovskite, solar cells, modeling, AFORS-HET-1D program, photovoltaics, promising material.

Жантуаров С.Р.<sup>1,2\*</sup>, Жолдыбаев Қ.С.<sup>1,2</sup>, Алдияров Ә.Ү.<sup>3</sup>,  
Мухамедшина Д.М.<sup>1</sup>, Токмолдин Н.С.<sup>1,3</sup>, Карни М.Дж.<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Физика-техникалық институты, Қазақстан, Алматы қ.

<sup>2</sup>Сәтпаев университеті, Қазақстан, Алматы қ.

<sup>3</sup>Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

<sup>4</sup>Суонси университеті, Ұлыбритания, Суонси қ.

\*e-mail: sultzhantuarov@mail.ru

### Перовскитті күн сәулелік элементтер модельдеу

Бұл мақалада күн сәулелерінің теориялық зерттеулеріне арналған. AFORS-HET-1D бағдарламасын қолданып, перовскит фотоэлектрлік түрлендіргіші қолданылды. Қорғасын-галлоидті метил аммоний қосылыстарынан тұратын Перовскит күн батареялары олардың жоғары өнімділігі мен ықтимал төмен өндірістік шығындарымен назар аударады. Бұл екі фактордың комбинациясы келешекте олар негізінде жоғары тиімді күн батареяларын алуға мүмкіндік береді, бұл қазіргі кезде қолданылатын фотовольтаикалық жасушалар үлгілерінің салыстырмалы көрсеткіштерімен салыстырғанда төмен болады. Осы жұмыста гетерокөшуді күн батареяларын үлгілеу үшін программалық пакетті қолдана отырып, перовскит фотоэлектрлік түрлендіргіштің моделі алынды, тиімділікті сипаттайтын тізбектердің параметрлері анықталды: кернеу, қысқа тұйықталу тогы, толтыру коэффициенті. Модельдеу кезінде күн батареясын өнімділікке және кванттық тиімділікке негізделген қабаттардың қалыңдығының әсері анықталды. Сондай-ақ, фотоэлемент тиімділігін одан әрі арттырудың әлеуетін анықтау үшін жұмыс жүргізілді. Оңтайландырудан кейін, тиімділігі 17% тиімді болатын перовскитке негізделген модель алынды.

**Түйін сөздер:** перовскит, күн сәулелік элементтерді, модельдеу, AFORS-HET-1D программасы, фотовольтаика перспективті материал.

### Введение

Перовскитные солнечные батареи начали активно изучать с 2009 года. За это время намечилась чёткая динамика по росту эффективности преобразования солнечной энергии: от 3,8% до более 20% [1]. Кроме того, изготовление перовскитных фотопреобразователей производят при низких температурах (<150 °C) [2], что означает, что производство перовскитных преобразователей менее энергозатратно. Перовскитные элементы могут быть изготовлены из широко распространённого и доступного материала [3], а следовательно будут быстрее окупаться.

В данной работе, используя программу для моделирования солнечных элементов AFORS-HET-1D, была получена модель фотоэлемента, проведена оптимизация данной модели для выявления потенциала дальнейшего роста его эффективности. AFORS-HET-1D позволяет рассчитывать эффективность солнечных батарей, вольт-амперные характеристики и квантовую эффективность, если предварительно задать ряд параметров. Нашей задачей, являлось, изучив

литературные источники, отыскать необходимые параметры и сделать пробную модель солнечного элемента на основе перовскита.

### Материалы и методы

Для проведения модельных расчетов были использованы параметры функциональных слоев, приведенные в иных источниках. В их числе ширина запрещенной зоны; концентрация, подвижность, тепловая скорость носителей заряда; коэффициенты рекомбинации. Параметры для моделей каждого слоя приведены в соответствующих таблице 1 ниже.

При построении модели были в программе выставлены следующие условия: DC (постоянный ток); Illumination (освещение): On (вкл.); spectral (спектральный) – вкл. освещение фронтальное; количество шагов для вычисления IV (ВАХ) в диапазоне 0-1,1 составляло 12, в диапазоне 0-1,2 составляло 13. Результаты по моделированию в виде параметров приведены в таблице 4 (Voc – напряжение холостого хода, Jsc – ток короткого замыкания, FF – фактор заполнения.)

Таблица 1 – Параметры для слоя Spiro-OMETAD [4-8], перовскитного слоя [14-25], диоксида титана [19-26]

#	Spiro-OMETAD	CH <sub>3</sub> NH <sub>3</sub> PbI <sub>3</sub>	TiO <sub>2</sub>
Dielectric constant (диэлектрическая постоянная), $\epsilon_c$	3 <sup>4</sup>	20, 07 <sup>9</sup>	31 <sup>19</sup>
Electron affinity $\chi_i$ , [eV] (средство электронов), [эВ]	2,2 <sup>4</sup>	4,1 <sup>10</sup>	4 <sup>20</sup>
Eg (bandgap), [eV] (ширина запрещенной зоны), [эВ]	2,91 <sup>4</sup>	1,5 <sup>11</sup>	3,2 <sup>19</sup>
Eg (opt. bandgap), [eV] (оптическая ширина запрещенной зоны), [эВ]	2,98 <sup>5</sup>	1,52 <sup>12</sup>	3,0 <sup>21</sup>
Nc (effective conduction band density), [cm <sup>-3</sup> ] плотность состояний зоны проводимости, [см <sup>-3</sup> ]	2,5*10 <sup>20</sup> <sup>4</sup>	0,01549*10 <sup>20</sup> <sup>9</sup>	7,65732*10 <sup>20</sup> <sup>22</sup>
Nv (effective valence band density), [cm <sup>-3</sup> ] плотность состояний валентной зоны, [см <sup>-3</sup> ]	2,5*10 <sup>20</sup> <sup>4</sup>	0,15926*10 <sup>20</sup> <sup>9</sup>	0,17327*10 <sup>20</sup> <sup>22</sup>
$\mu_n$ (effective electron mobility), [cm <sup>2</sup> /Vs] (подвижность электронов), [см <sup>2</sup> /Вс]	10 <sup>-4</sup> <sup>4</sup>	12,5 <sup>13</sup>	7 <sup>23</sup> ,
$\mu_p$ (effective hole mobility), [cm <sup>2</sup> /Vs] (подвижность дырок), [см <sup>2</sup> /Вс]	10 <sup>-4</sup> <sup>4</sup>	7,5 <sup>13</sup>	0,0369 <sup>24</sup>
Na (doping concentration acceptors), [cm <sup>-3</sup> ] (акцепторная примесная концентрация), [см <sup>-3</sup> ]	10 <sup>19</sup> <sup>6</sup>	4*10 <sup>14</sup> <sup>14</sup>	0 <sup>24</sup>
Nd (doping concentration donators), [cm <sup>-3</sup> ] (донорная примесная концентрация), [см <sup>-3</sup> ]	0 <sup>4</sup>	2,8* 10 <sup>17</sup> <sup>14</sup>	10 <sup>19</sup> <sup>25</sup>
ve (electron thermal velocity), [cm/s] (тепловая скорость электронов), [см/с]	10 <sup>7</sup> <sup>7</sup>	3,816*10 <sup>3</sup> <sup>15</sup>	10,665*10 <sup>4</sup> <sup>15</sup>
vh (hole thermal velocity), [cm/s] (тепловая скорость дырок), [см/с]	10 <sup>7</sup> <sup>7</sup>	3,017*10 <sup>3</sup> <sup>15</sup>	3,016*10 <sup>4</sup> <sup>15</sup>
$\rho$ (layer density), [g*cm <sup>-3</sup> ] (плотность слоя), [г*см <sup>3</sup> ]	1 <sup>8</sup>	4,2864 <sup>16</sup>	2,9 <sup>26</sup>
gae (auger electron recombination coefficient) [cm <sup>6</sup> /s] (коэффициент рекомбинации Оже-электронов), [см <sup>6</sup> /с]	0 <sup>4</sup>	10 <sup>-28</sup> <sup>17</sup> ;	0 <sup>22</sup>
band to band recombination coefficient, [cm <sup>3</sup> /s] (излучательная рекомбинация), [см <sup>3</sup> /с]	0 <sup>4</sup>	10 <sup>-10</sup> <sup>18</sup>	0 <sup>22</sup>

### Результаты и их обсуждение

В таблице 2 представлены результаты моделирования в программе AFORS-HET-1D при различных значениях толщины составных слоёв солнечного элемента: 50, 100, 150, 200, 300 нм. Перебираются все возможные комбинации с целью нахождения оптимальных значений толщин.

На основе указанных данных можно заключить, что заметнее на эффективность влияют TiO<sub>2</sub> (диоксид титана – слой *n*-типа) и (CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>) перовскит, а Spiro-OMETAD (слой *p*-типа), кроме изменения на 0,01 % в последнем случае, не оказывает такого влияния. Также стоит отметить, что с ростом толщины перовскита или с уменьшением толщины диоксида титана, повышается эффективность моделируемого солнечного элемента. Кроме того, в программе были построены вольтамперные характеристики для

каждых толщин, данные которых приведены на рисунке 1 (см. ниже). По вольтамперным характеристикам также видно, что плотность тока в моделях растёт с увеличением толщины перовскита: самая высокая плотность тока у элементов с наибольшей толщиной перовскитов – 300 нм. Воздействие толщины диоксида титана на графиках лучше всего просматривается при толщинах 300 нм, где у модели с толщиной слоя диоксида титана 200 нм, плотность тока –  $J_{sc} = 18,75$  мА/см<sup>2</sup>, немного ниже значений плотности тока у элементов с толщиной диоксида титана 100 нм –  $J_{sc} = 19,06$  мА/см<sup>2</sup>. Подобная ситуация аналогична и для слоёв с толщинами диоксида титана 50 нм и 100 нм, у которых плотность тока немного выше по значениям:  $J_{sc} = 11,78$  мА/см<sup>2</sup> (TiO<sub>2</sub> – 250 нм) против  $J_{sc} = 11,61$  мА/см<sup>2</sup> (TiO<sub>2</sub> – 100 нм), и  $J_{sc} = 16,35$  мА/см<sup>2</sup> (TiO<sub>2</sub> – 100 нм) против  $J_{sc} = 16,19$  мА/см<sup>2</sup> (TiO<sub>2</sub> – 150 нм).

Таблица 2 – Варьирование всех трёх слоев

№	Слои	Толщина, нм	Параметры цепи	Эффективность
1	Перовскит, TiO <sub>2</sub> , Spiro-OMeTAD	100 100 100	Voc=1077 мВ, Jsc=11,61 мА/см <sup>2</sup> , FF=87,63%	10,96%
22	Перовскит, TiO <sub>2</sub> , Spiro-OMeTAD	100 50 100	Voc=1079 мВ, Jsc=11,78 мА/см <sup>2</sup> , FF=87,55%	11,13%
33	Перовскит, TiO <sub>2</sub> , Spiro-OMeTAD	100 100 50	Voc=1077 мВ, Jsc=11,61 мА/см <sup>2</sup> , FF=87,64%	10,96%
44	Перовскит, TiO <sub>2</sub> , Spiro-OMeTAD	200 100 100	Voc=1066 мВ, Jsc=16,35 мА/см <sup>2</sup> , FF=83,48%	14,55%
55	Перовскит, TiO <sub>2</sub> , Spiro-OMeTAD	200 150 100	Voc=1066 мВ, Jsc=16,19 мА/см <sup>2</sup> , FF=73,89%	12,75%
66	Перовскит, TiO <sub>2</sub> , Spiro-OMeTAD	200 100 150	Voc=1066 мВ, Jsc=16,35 мА/см <sup>2</sup> , FF=83,48%	14,55%
77	Перовскит, TiO <sub>2</sub> , Spiro-OMeTAD	300 100 100	Voc=1059 мВ, Jsc=19,06 мА/см <sup>2</sup> , FF=83,93%	16,94%
88	Перовскит, TiO <sub>2</sub> , Spiro-OMeTAD	300 200 100	Voc=1059 мВ, Jsc=18,75 мА/см <sup>2</sup> , FF=83,92%	16,66%
99	Перовскит, TiO <sub>2</sub> , Spiro-OMeTAD	300 100 200	Voc=1059 мВ, Jsc=19,06 мА/см <sup>2</sup> , FF=83,92%	16,93%

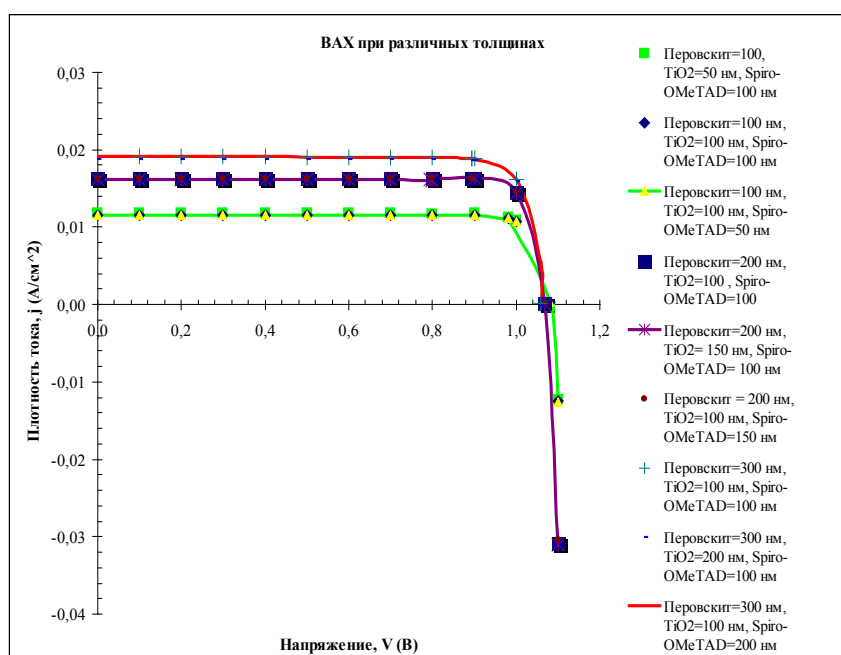


Рисунок 1 – Вольтамперные характеристики моделей перовскитных солнечных элементов при различных толщинах

Этот факт позволяет перейти к следующему шагу: из имеющихся данных по толщинам выбрать самую удачную комбинацию. В связи с тем, что толщина Spiro-OMeTAD не влияла на эффективность, кроме одного случая, где произошло изменение на 0,01 %, можно для данного слоя выбрать три варианта толщины: 200 нм, 150

нм, 100 нм. Для перовскита можно максимальную толщину, для  $\text{TiO}_2$  – минимальную. В итоге имеем три варианта: 1) перовскит – 300 нм,  $\text{TiO}_2$  – 50 нм, Spiro-OMeTAD – 200 нм, 2) перовскит – 300 нм,  $\text{TiO}_2$  – 50 нм, Spiro-OMeTAD – 150 нм, 3) перовскит – 300 нм,  $\text{TiO}_2$  – 50 нм, Spiro-OMeTAD – 100 нм.

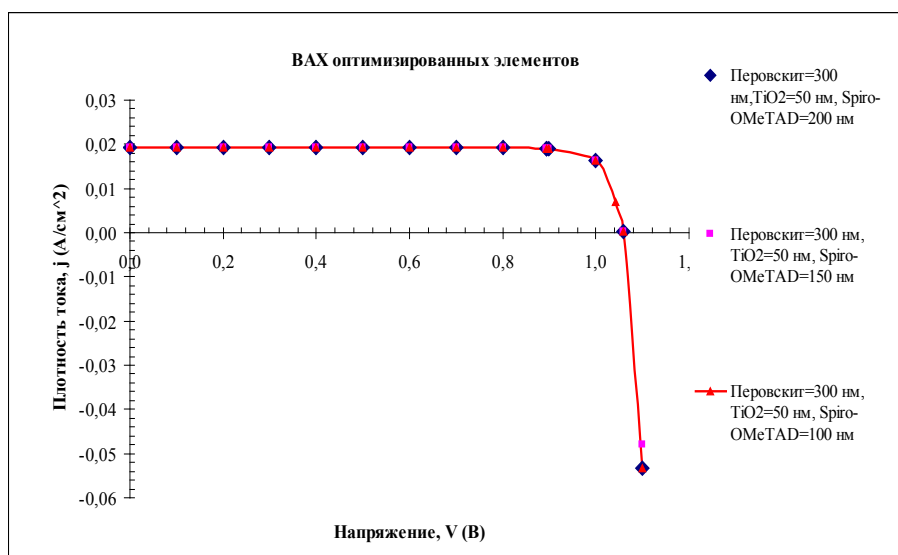


Рисунок 2 – Вольтамперные характеристики модели оптимизированных элементов при различных толщинах Spiro-OMeTAD

В ходе моделирования результат в трёх комбинациях совпадает:  $V_{oc}=1059$  мВ,  $J_{sc}=19,26$  мА/см<sup>2</sup>,  $FF=83,93\%$ ,  $Eff=17,11\%$ . Минимальная толщина  $\text{TiO}_2$  и максимальная толщина перовскита позволила поднять эффективность, тогда как Spiro-OMeTAD – не повлиял на нее. На практике Spiro-OMeTAD, закрывая перовскит, обеспечивает его защиту, поэтому данный слой можно делать толще. Если смотреть с точки зрения модели, то на эффективность это не должно влиять. Тогда получается, что оптимальной

комбинацией будет является: перовскит – 300 нм,  $\text{TiO}_2$  – 50 нм, Spiro-OMeTAD – 200 нм. Среди возможных вариаций, эффективность в этом случае самая высокая – 17,11%.

Программа AFORS-НЕТ позволяет получать не только вольтамперные характеристики модели солнечных элементов, но и рассчитывать квантовую эффективность (КЭ), поэтому для различных толщин перовскита была вычислена квантовая эффективность, результаты которых приведены на рисунке 3 и таблице 3.

Таблица 3 – Данные по толщинам слоев и результатам: по коэффициентам преобразованной эффективности (ConvEff) и по току внешней квантовой эффективности ( $I_{eqe}$ )

№	Толщины слоев, нм	Результаты
1	Перовскит – 100, $\text{TiO}_2$ – 50, Spiro-OMeTAD – 100	ConvEff=0,911, $I_{eqe}=120,010$ mA/cm <sup>2</sup>
2	Перовскит – 200, $\text{TiO}_2$ – 50, Spiro-OMeTAD – 150	ConvEff=0,934, $I_{eqe}=165,381$ mA/cm <sup>2</sup>
3	Перовскит – 300, $\text{TiO}_2$ – 50, Spiro-OMeTAD – 200	ConvEff=0,94, $I_{eqe}=190,604$ mA/cm <sup>2</sup>

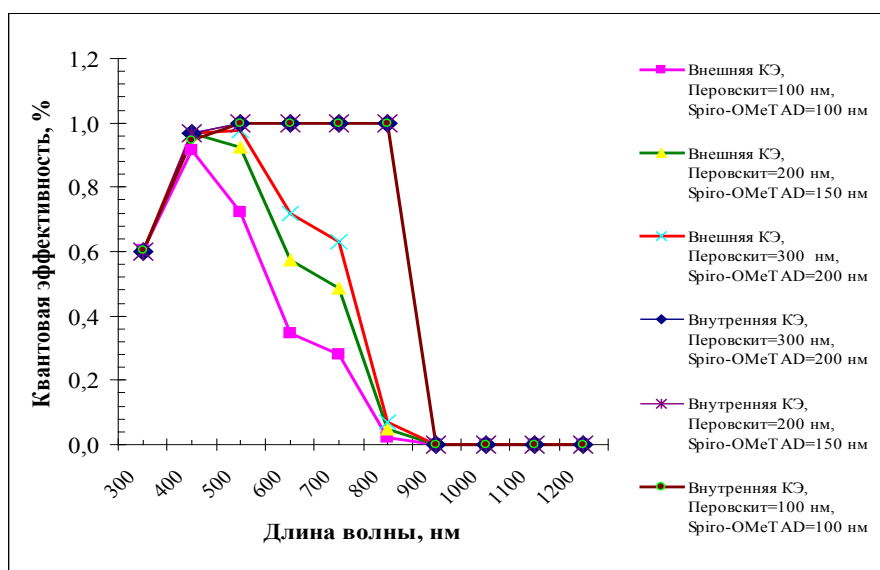


Рисунок 3 – Графики квантовой эффективности для различных толщин перовскита

Из таблицы и рисунков видно, что увеличивается коэффициент преобразованной эффективности и ток внешней квантовой эффективности с ростом толщины перовскита.

### Заключение

Поиск и использование данных из различных работ даёт возможность делать в программных средах модели солнечных элементов, которые вполне по КПД соответствуют реальным прототипам – 17,11%. Также в работе была выявлена и рассмотрена зависимость эффективности модели солнечного элемента от толщин перовскита

и диоксида титана через построение в программе вольт-амперных характеристик и квантовой эффективности. В результате моделирования установлено, что эффективность элемента зависит пропорционально от толщины перовскита и обратно пропорционально от толщины диоксида титана. Также продемонстрирована возможность использовать программу AFORS-HET для построения моделей перовскитных солнечных элементов.

**Благодарность.** Работа была выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта ИРН AP05133651.

### Литература

- 1 Yang W. S. et al. Iodide management in formamidinium-lead-halide-based perovskite layers for efficient solar cells // *Science*. – 2017. – Т. 356. – №. 6345. – С. 1376-1379.
- 2 Williams A. E. et al. Perovskite processing for photovoltaics: a spectro-thermal evaluation // *Journal of Materials Chemistry A*. – 2014. – Т. 2. – №. 45. – С. 19338-19346.
- 3 Kazim S. et al. Perovskite as light harvester: a game changer in photovoltaics // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2014. – Т. 53. – №. 11. – С. 2812-2824.
- 4 Liu F. et al. Numerical simulation: toward the design of high-efficiency planar perovskite solar cells // *Applied Physics Letters*. – 2014. – Т. 104. – №. 25. – С. 253508.
- 5 Krishna A. et al. Novel hole transporting materials based on triptycene core for high efficiency mesoscopic perovskite solar cells // *Chemical Science*. – 2014. – Т. 5. – №. 7. – С. 2702-2709.
- 6 García-Cañadas J. et al. Determination of electron and hole energy levels in mesoporous nanocrystalline TiO<sub>2</sub> solid-state dye solar cell // *Synthetic metals*. – 2006. – Т. 156. – №. 14-15. – С. 944-948.
- 7 Anwar F. et al. Effect of Different HTM Layers and Electrical Parameters on ZnO Nanorod-Based Lead-Free Perovskite Solar Cell for High-Efficiency Performance // *International Journal of Photoenergy*. – 2017. – Т. 2017.
- 8 Abate A. et al. Lithium salts as “redox active” p-type dopants for organic semiconductors and their impact in solid-state dye-sensitized solar cells // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2013. – Т. 15. – №. 7. – С. 2572-2579.

- 9 Brandt R. E. et al. Identifying defect-tolerant semiconductors with high minority-carrier lifetimes: beyond hybrid lead halide perovskites // *MRS Communications*. – 2015. – Т. 5. – №. 2. – С. 265-275.
- 10 Frost J. M. et al. Atomistic origins of high-performance in hybrid halide perovskite solar cells // *Nano letters*. – 2014. – Т. 14. – №. 5. – С. 2584-2590.
- 11 Feng W. Perovskite Solar Cells // *Adv. Funct. Mater.* – 2014. – Т. 24. – С. 151.
- 12 Ke X. et al. Optical band gap transition from direct to indirect induced by organic content of CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> perovskite films // *Applied Physics Letters*. – 2015. – Т. 107. – №. 9. – С. 091904.
- 13 Ponceca Jr C. S. et al. Organometal halide perovskite solar cell materials rationalized: ultrafast charge generation, high and microsecond-long balanced mobilities, and slow recombination // *Journal of the American Chemical Society*. – 2014. – Т. 136. – №. 14. – С. 5189-5192.
- 14 Wang Q. et al. Qualifying composition dependent p and n self-doping in CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub> // *Applied Physics Letters*. – 2014. – Т. 105. – №. 16. – С. 163508.
- 15 X.-Y. Zhu and V. Podzorov Charge Carriers in Hybrid Organic–Inorganic Lead Halide Perovskites Might Be Protected as Large Polarons // *J. Phys. Chem. Lett.* – 2015 – Т.6 – №.23 – С. 4758–4761.
- 16 Starr D. E. et al. Direct observation of an inhomogeneous chlorine distribution in CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3-x</sub>Cl<sub>x</sub> layers: surface depletion and interface enrichment // *Energy & Environmental Science*. – 2015. – Т. 8. – №. 5. – С. 1609-1615.
- 17 Cadelano M. et al. Photoexcitations and Emission Processes in Organometal Trihalide Perovskites // *Perovskite Materials- Synthesis, Characterisation, Properties, and Applications*. – InTech, 2016.
- 18 Hutter E. M. et al. Charge carriers in planar and meso-structured organic–inorganic perovskites: mobilities, lifetimes, and concentrations of trap states // *The journal of physical chemistry letters*. – 2015. – Т. 6. – №. 15. – С. 3082-3090.
- 19 Soga T. (ed.). Nanostructured materials for solar energy conversion. – Elsevier, 2006.
- 20 Hope G. A., Bard A. J. Platinum/titanium dioxide (rutile) interface. Formation of ohmic and rectifying junctions // *J. Phys. Chem.* – 1983. – Т. 87. – №. 11. – С. 1979-84.
- 21 Морозов А. Н. Синтез и каталитические свойства наноструктурированных покрытий диоксида титана. – Москва, 2014.
- 22 Enright B., Fitzmaurice D. Spectroscopic determination of electron and hole effective masses in a nanocrystalline semiconductor film // *The Journal of Physical Chemistry*. – 1996. – Т. 100. – №. 3. – С. 1027-1035.
- 23 Mizuno T. et al. Electric field thermopower modulation analysis of an interfacial conducting layer formed between Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> and rutile TiO<sub>2</sub> // *Journal of Applied Physics*. – 2011. – Т. 110. – №. 6. – С. 063719.
- 24 Deskins N. A., Dupuis M. Intrinsic hole migration rates in TiO<sub>2</sub> from density functional theory // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2008. – Т. 113. – №. 1. – С. 346-358.
- 25 Sathasivam S. et al. Tungsten doped TiO<sub>2</sub> with enhanced photocatalytic and optoelectrical properties via aerosol assisted chemical vapor deposition // *Scientific reports*. – 2015. – Т. 5. – С. 10952.
- 26 Anderson O. et al. Density and Young's modulus of thin TiO<sub>2</sub> films // *Fresenius' journal of analytical chemistry*. – 1997. – Т. 358. – №. 1-2. – С. 315-318.

### References

- 1 W.S. Yang, B.W. Park, E.H. Jung, N.J. Jeon, Y.C. Kim, D.U. Lee, and S.I. Seok, *Science*, 356(6345), 1376-1379 (2017).
- 2 A.E. William, P.J. Holliman, M.J. Carnie, M.L. Davies, D.A. Worsley, and T.M. Watson, *Journal of Materials Chemistry A*, 2(45), 19338-19346 (2014).
- 3 S. Kazim, M.K. Nazeeruddin, M. Grätzel, and S. Ahmad, *Angewandte Chemie International Edition*, 53(11), 2812-2824 (2014).
- 4 F. Liu, J. Zhu, J. Wei, Y. Li, M. Lv, S. Yang, ... and S. Dai, *Applied Physics Letters*, 104(25), 253508 (2014).
- 5 Krishna, D. Sabba, H. Li, J. Yin, P.P. Boix, C. Soci, ... and A.C. Grimsdale, *Chemical Science*, 5(7), 2702-2709 (2014).
- 6 J. García-Cañadas, F. Fabregat-Santiago, H.J. Bolink, E. Palomares, G. Garcia-Belmonte, and J. Bisquert, *Synthetic metals*, 156 (14-15), 944-948 (2006).
- 7 F. Anwar, R. Mahbub, S.S. Satter, and S.M. Ullah, *International Journal of Photoenergy* (2017).
- 8 Abate, T. Leijtens, S. Pathak, J. Teuscher, R. Avolio, M.E. Errico, ... and H.J. Snaith, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(7), 2572-2579 (2013).
- 9 R.E. Brandt, V. Stevanović, D.S. Ginley, and T. Buonassisi, *MRS Communications*, 5(2), 265-275 (2015).
- 10 J.M. Frost, K.T. Butler, F. Brivio, C.H. Hendon, M. Van Schilfegaarde, and A. Walsh, *Nano letters*, 14(5), 2584-2590 (2014).
- 11 H. Zhou, Q. Chen, G. Li, S. Luo, T.B. Song, H.S. Duan, ... and Y. Yang, *Science*, 345(6196), 542-546 (2014).
- 12 X. Ke, J. Yan, A. Zhang, B. Zhang, and Y. Chen, *Applied Physics Letters*, 107(9), 091904 (2015).
- 13 C.S. Ponceca Jr, T.J. Savenije, M. Abdellah, K. Zheng, A. Yartsev, T. Pascher, ... and J.P. Wolf, *Journal of the American Chemical Society*, 136(14), 5189-5192 (2014).
- 14 Q. Wang, Y. Shao, H. Xie, L. Lyu, X. Liu, Y. Gao, and J. Huang, *Applied Physics Letters*, 105(16), 163508 (2014)
- 15 X.-Y. Zhu and V. Podzorov, *J. Phys. Chem. Lett.*, 6 (23), 4758–4761 (2015)

- 16 D.E. Starr, G. Sadoughi, E. Handick, R.G. Wilks, J.H. Alsmeier, L. Köhler, ... and M. Bär, *Energy & Environmental Science*, 8(5), 1609-1615 (2015)
- 17 M. Cadelano, M. Saba, N. Sestu, V. Sarritzu, D. Marongiu, F. Chen, ... and G. Bongiovanni, *Perovskite Materials-Synthesis, Characterisation, Properties, and Applications*, InTech (2016).
- 18 E.M. Hutter, G.E. Eperon, S.D. Stranks, and T.J. Savenije, *The journal of physical chemistry letters*, 6(15), 3082-3090 (2015).
- 19 Soga Tetsuo, ed, *Nanostructured materials for solar energy conversion*, (Elsevier, 2006), 595 p.
- 20 G.A. Hope, and A.J. Bard, *J. Phys. Chem*, 87(11), 1979-84 (1983)
- 21 A.N. Morozov *Sintez i catalyticheskie svoistva nanostructuirovannyh pokrytii dioksida titana*, (Moskva, 2014), 160 p. (in Russ).
- 22 Enright & D. Fitzmaurice, *The Journal of Physical Chemistry*, 100(3), 1027-1035 (1996).
- 23 T. Mizuno, Y. Nagao, A. Yoshikawa, K. Koumoto, T. Kato, Y. Ikuhara, and H. Ohta, *Journal of Applied Physics*, 110(6), 063719 (2011).
- 24 N.A. Deskins, and M. Dupuis, *The Journal of Physical Chemistry C*, 113(1), 346-358 (2008).
- 25 S. Sathasivam, D.S. Bhachu, Y. Lu, N. Chadwick, S.A. Althabaiti, A.O. Alyoubi, ... and I.P. Parkin, *Scientific reports*, 5, 10952 (2015).
- 26 O. Anderson, C.R. Ottermann, R. Kuschnereit, P. Hess, and K. Bange *Fresenius' journal of analytical chemistry*, 358(1-2), 315-318 (1997).



**Сламия М. \*, Жұмадилов Р., Досболаев М.Қ.,  
Ертаев О.А., Рамазанов Т.С.**

Ашық түрдегі ұлттық нанотехнологиялық зертхана,  
әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.,  
\*e-mail: s.mauletbek@gmail.com

## **МОДИФИКАЦИЯЛАНҒАН МАГНЕТРОНДЫҚ ТОЗАҢДАҢДЫРУ ӘДІСІМЕН МЫС НАНОБӨЛШЕКТЕРІН ӨСІРУ**

Қазіргі таңда наноматериалдар өздерінің ерекше қасиеттері мен қолдану аясының кеңдігіне байланысты жан-жақты зерттелуде. Мыс нанобөлшектері химиялық, физикалық, катализдік, антибактериалық және жылу-өткізгіштік қасиеттеріне байланысты оларды медицина, электроника, энергетикада және т.б. салаларда қолдану үлкен қызығушылықтар тудырады. Мыс нанобөлшектерін синтездеу Ag, Au және Pt сияқты асыл металдармен салыстырғанда экономикалық тұрғыдан тиімді. Химиялық қалпына келтіру, микроэмульсия әдісі, электролиттік синтез, золь-гель әдісі, бу фазасынан вакуумды тұндыру және т.б. сияқты мыс нанобөлшектерін синтездеудің әр түрлі әдістері бар. Нано және макробөлшектерді алудың эффективті әрі таза тәсілі – магнетронды тозаңдандыру әдісі. Мысалы, нанобөлшектерді термиялық әдіспен алу, олардың өшемдерін бақылауды қиындатады. Бұл жұмыста магнетрондық тозаңдандыру әдісі көмегімен синтезделген және өсірілген нанобөлшектердің газдық разряд параметріне тәуелділігі зерттеліп, эксперименттік нәтижелері келтірілген. Шығыстағы нанобөлшектердің өшемдері камерадағы қысым шамасын арттырғанда кішірейетіні және разряд тогының күшін арттырғанда өсетіндігі байқалды. Алынған үлгілер сканерлеуші электрондық микроскоп (СЭМ) көмегімен зерттелді. Сонымен қатар, эксперименттерде алынған нанобөлшектердің химиялық құрамы мен өшемдері бойынша таралуы көрсетілген. Синтезделген мыс нанобөлшектердің диаметрі 36 нм-ден 300 нм аралығында.

**Түйін сөздер:** Газдық разряд, магнетрондық тозаңдандыру, мыс нанобөлшектері.

Slamia M. \*, Zhumadilov R., Dosbolayev M.K., Yertayev O.A., Ramazanov T.S.

National nanotechnology laboratory of open type,  
Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty,  
\*e-mail: s.mauletbek@gmail.com

### **Growth of copper nanoparticles by modified magnetron sputtering**

Study of nanomaterials have received considerable attention due to their unique properties and numerous applications in different fields. Metallic nanoparticles are of great interest due to their excellent chemical, physical and catalytic properties. Copper nanoparticles attracted a lot of attention because of their well-known properties, such as high electrical and thermal conductivity, antibacterial and antifungal effects, high catalytic activity, etc. Cu nanoparticles were considered cost-effective in compare with other noble metals, such as Ag, Au and Pt. There are various methods for the synthesis of copper nanoparticles, such as chemical reduction, microemulsion method, electrolytic synthesis, sol-gel method, vacuum vapor deposition, etc. The most simple but effective way of obtaining nano and microparticles is the magnetron sputtering method. Each method presents its own shortcomings. In this paper the dependence of the copper nanoparticles growth on the gas discharge parameters obtained by magnetron sputtering method are investigated. As a result of experimental work, it was revealed that the synthesis of copper nanoparticles is influenced by various parameters, such as gas pressure in chamber

and discharge current. The obtained samples were analyzed by scanning electron microscopy (SEM). The Cu nanoparticles have a spherical shape and have a diameter from 36 nm to 300 nm.

**Key words:** Gas discharge, magnetron sputtering, copper nanoparticles.

Сламия М.\*, Жумадилов Р., Досболаев М.К., Ертаев О.А., Рамазанов Т.С.

Национальная нанотехнологическая лаборатория открытого типа,  
Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы,  
\*e-mail: s.mauletbek@gmail.com

### Получение наночастиц меди методом модифицированного магнетронного распыления

Исследования в наноматериалах получили значительное внимание из-за их уникальных свойств и многочисленных применений в разных областях. Металлические наночастицы представляют большой интерес благодаря своим отличным химическим, физическим и каталитическим свойствам. Наночастицы меди привлекли большое внимание из-за их хорошо известных свойств, таких как высокая электрическая и теплопроводность, антибактериальные и противогрибковые эффекты, высокая каталитическая активность и т.д. Синтез наночастиц меди экономически эффективно по сравнению с благородными металлами, такими как Ag, Au и Pt. Существуют различные методы синтеза наночастиц меди, такие как химическое восстановление, метод микроэмульсии, электролитический синтез, золь-гель-метод, вакуумное осаждение из паровой фазы и т. д. К наиболее чистым и эффективным способом получения нано и макрочастиц металлов – метод магнетронного распыления. В данной работе была исследована зависимость роста наночастиц, полученных методом магнетронного распыления меди, от параметров газового разряда. В результате экспериментальных работ было выявлено, что, на синтез медных наночастиц данным методом влияют различные параметры, такие как давление газа рабочей среды и сила тока. Полученные образцы были исследованы методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ). Размеры полученных медных наночастиц лежат в диапазоне от 36 нм до 300 нм.

**Ключевые слова:** газовый разряд, магнетронное распыление, наночастицы меди.

### Кіріспе

Металл нанобөлшектері химиялық, физикалық және катализдік қасиеттеріне байланысты оларды түрлі салаларда қолдану үлкен қызығушылықтар тудырады [1-5]. Мыс нанобөлшектері жоғары электрлік және жылу-өткізгіштік [6], антибактериялық [7-9] және т.б. қасиеттеріне байланысты ерекшеленеді. Нанобөлшектерді магнетрондық тозандандыру арқылы синтездеу қазіргі таңдағы көп тараған әдістердің бірі [10-15]. Бұл әдістің артықшылықтары: жұмыс өнімділігі жоғары, өсірілетін бөлшектердің өлшемдерінің дисперстілігі кең диапазонды, химиялық құрамының таза болуы және газдық разрядты айналымы қорек көзі арқылы жағу диэлектрик материалдардың нанобөлшектерін өсіруге мүмкіндік береді [16-23].

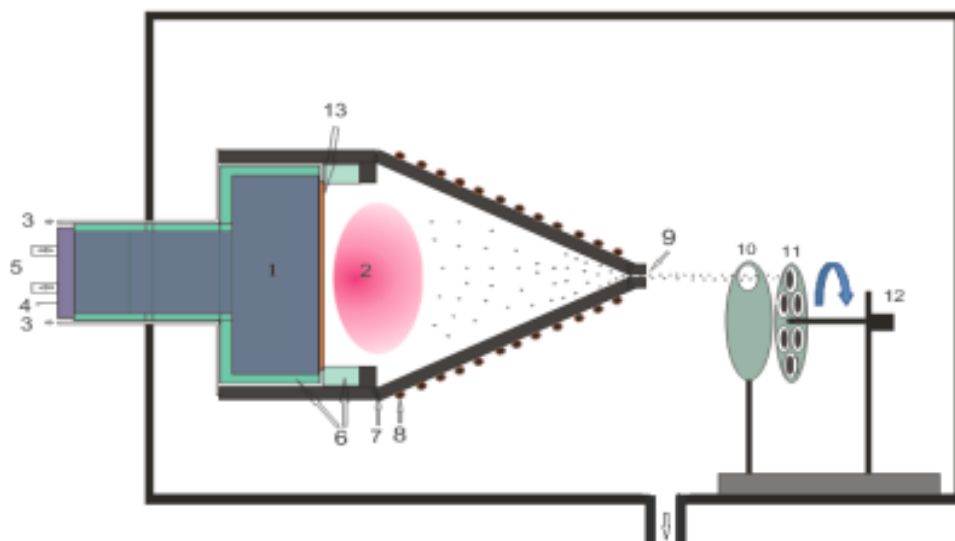
### Эксперименттік қондырғы

Магнетрондық тозандандыру төмен қысымда жұмыс жасайды және жұмыс газы ретінде ар-

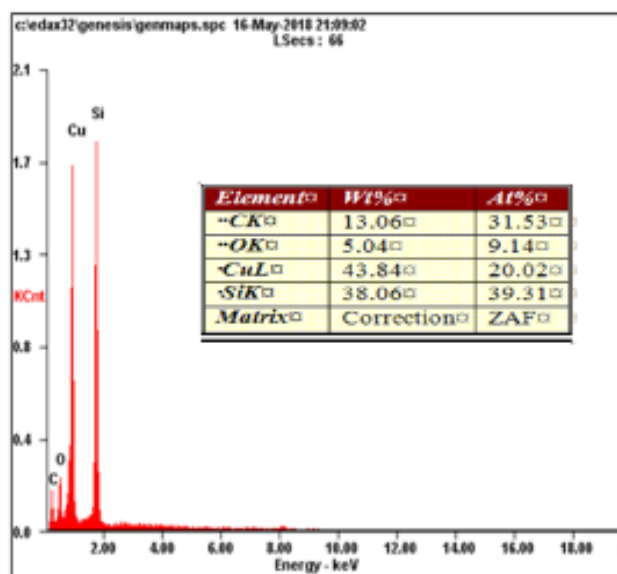
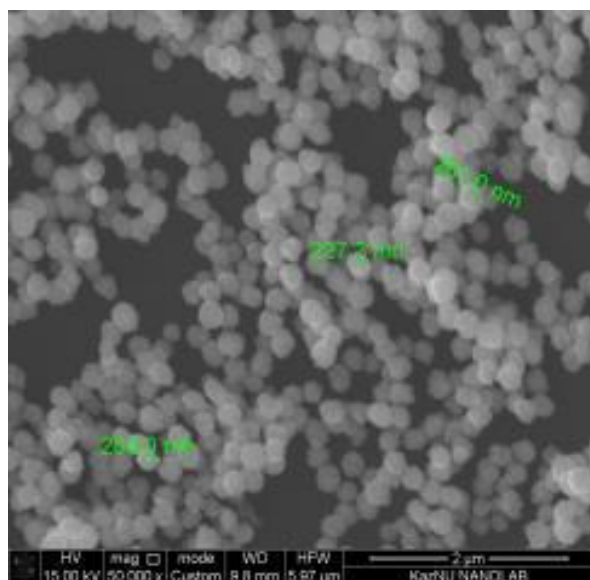
гон газы қолданылды. Тұрақты магниттер және бөлшектерді (молекулалар, нано кластерлер) біріктіру аумағы сумен суытылып тұрады. Эксперименттік қондырғының негізгі бөлігінің жұмыс істеу принципі Хаберлен ұсынған магнетрон нұсқасына сәйкес келеді [24-26]. Магнетрондық тозандандыру қондырғысының принциптік схемасы 1-суретте көрсетілген. Эксперимент барысында газ қысымы 0,5–1,5 торр аралығында, газдық разрядтың ток күші 0,2–0,6 А аралығында өзгеріп тұрады. Плазма мыстан жасалған электродпен (катод) біріктіру камерасының қабырғасы аралығында жанады. Плазманың жану уақыты 10 минут.

### Эксперимент нәтижелері

Осылайша, бұл жұмыста тұрақты токтың әр түрлі мәндерінде магнетрондық тозандандыру әдісімен мыс нанобөлшектері синтезделді. Магнетрон көмегімен синтезделген мыс нанобөлшектерінің СЭМ кескіні мен химиялық құрамы 2-суретте көрсетілген.



**1-сурет** – Магнетрондық тозандандырғыш қондырғысының принциптік схемасы:  
 1 – Магнетрон, 2 – Плазма, 3 – Газ кіретін түтікше (аргон), 4 – Электрлік жалғау,  
 5 – Суыту жүйесі, 6 – Диэлектриктік оқшаулауыш, 7 – Біріктіру камерасы,  
 8 – Біріктіру камерасының суыту жүйесі, 9 – Шығыс саңылауы, 10 – Экран,  
 11 – Төсеніш (кремний), 12 – Қозғалтқыш



**2-сурет** – Үлгі ретінде синтезделген мыс нанобөлшектерінің СЭМ кескіні мен химиялық құрамы

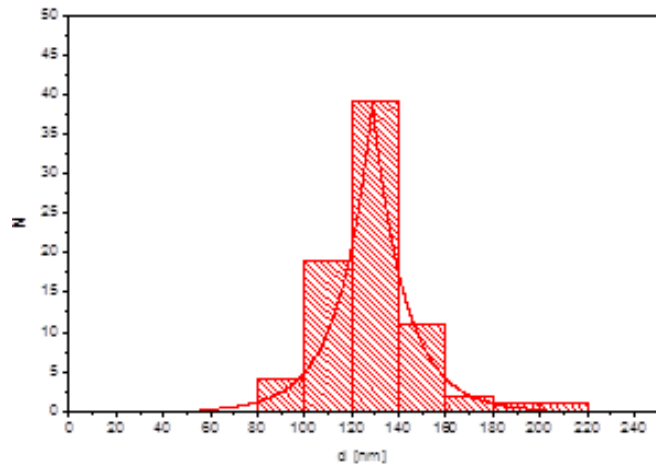
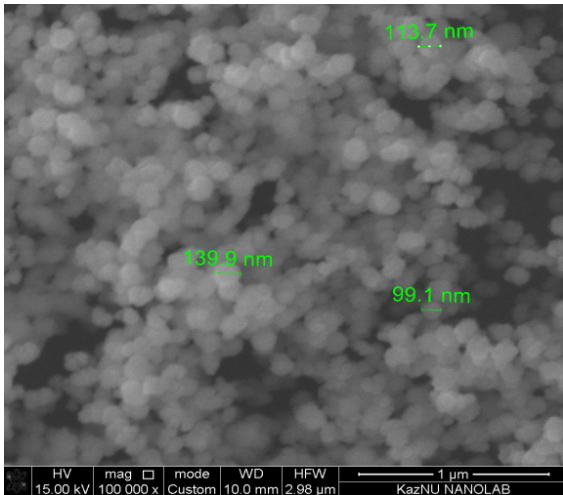
Синтезделген нанобөлшектердің өлшемдерінің газ қысымына тәуелділігі эксперименттік тұрғыда анықталды. Камерадағы газ қысымын, газ ағынын реттеу арқылы нанобөлшектердің өлшемдерін және концентрациясын өзгертуге болады. Магнетронды тозандандыру тогы 0,5 А, ал жұмыс газының қысымы 0,6 торр және 1,2 торр болған кездегі синтезделген мыс нанобөлшектерінің СЭМ – кескіні мен олардың

өлшемдері бойынша таралуы 3-суретте көрсетілген. Газ қысымы жоғары (1.2 торр) болған кезде тозандандырылған атомдардың жиі кездесетін қақтығыстары, оның энергиясын жоғалтуға және аз өлшемді нанобөлшектерді төсеніште тұндыруға әкелуі мүмкін. Яғни, атомдардың төменгі беткі диффузиясының салдарынан олардың өлшемдері өспейді. Ал егер газқысымы төмен (0.6 торр) болса, онда атомдардың қозғалғыштығының

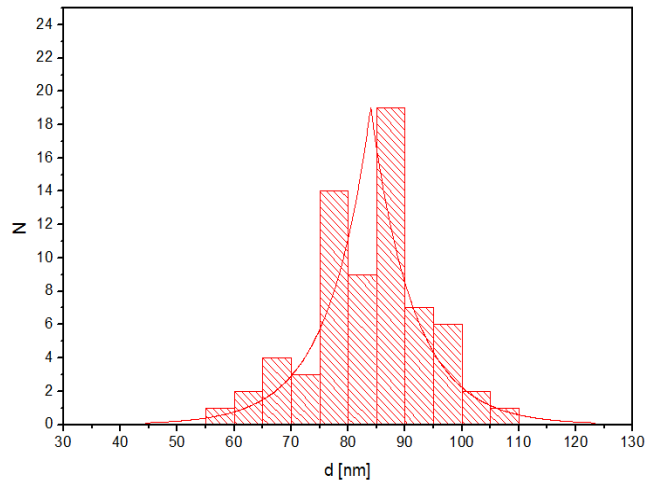
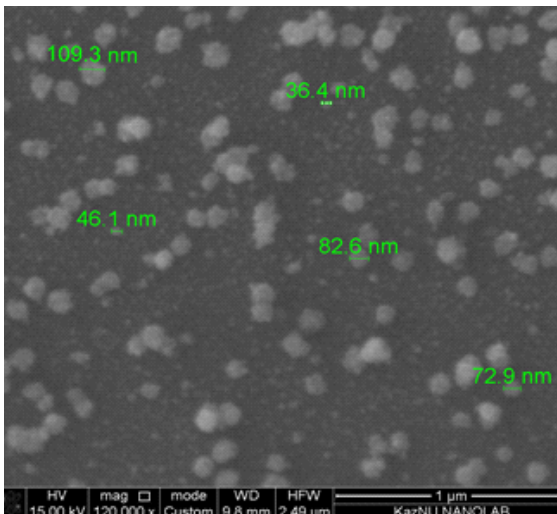
жоғарылауына байланысты синтезделген нанобөлшектердің өлшемдері артады.

Жұмыс газының қысымы 0,6 торр, ал газдық разрядтың ток күші 0,2 А және 0,5 А болған кездегі синтезделген мыс нанобөлшектерінің СЭМ кескіні 4-суретте көрсетілген. Разряд то-

ғын жоғарылатқан кезде нанобөлшектердің өлшемдері артатындығы байқалды. Яғни разряд тогы артқан кезде электрондар мен иондардың нысанаға соқтығысу процесі артуы салдарынан нысана қарқынды тозаңданып, плазмада нанобөлшектердің тез қалыптасуына әкеледі.



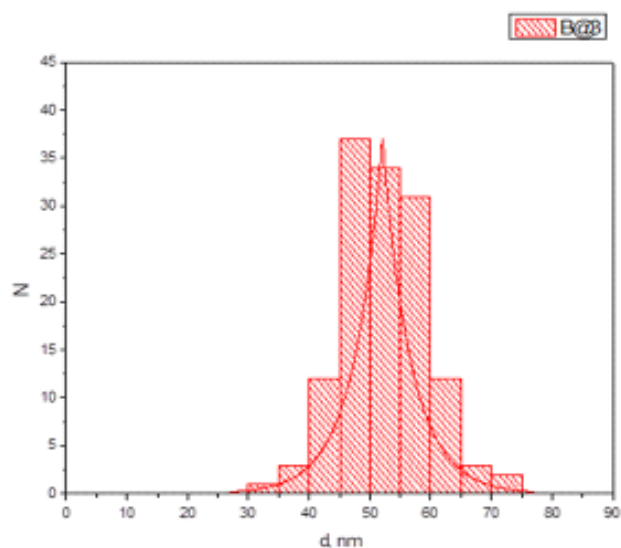
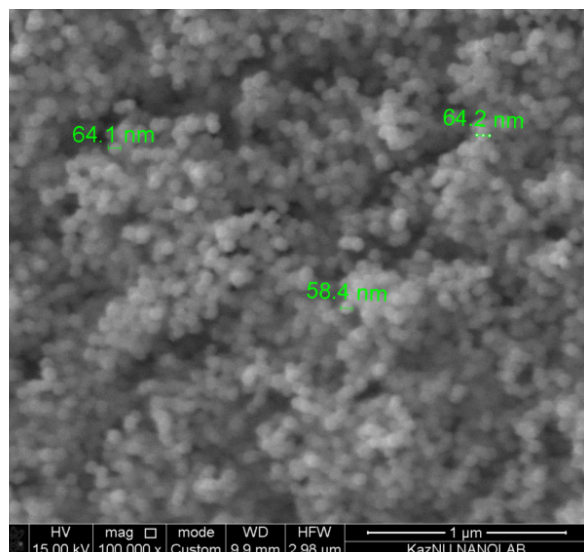
a)



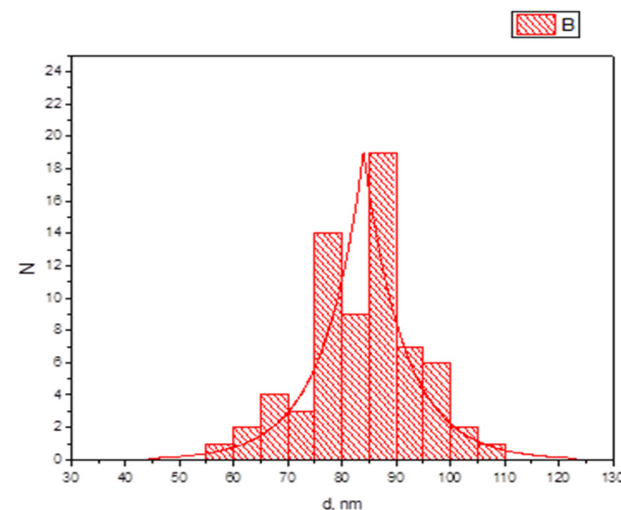
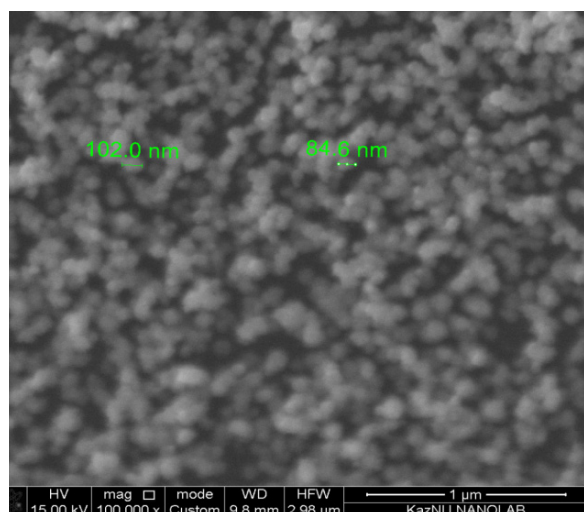
b)

**3-сурет** – Синтезделген мыс нанобөлшектері диаметрінің газ қысымынан тәуелділігі:

$I = 0,5A$ . a)  $p = 0,6$  торр. b)  $p = 1,2$  торр



a)



b)

4-сурет – Синтезделген мыс нанобөлшектері диаметрінің разряд тогынан тәуелділігі:  
 $p = 0.6$  топ. а)  $I = 0,2A$ ; б)  $I = 0,5A$

### Қорытынды

Бұл мақалада модификацияланған магнетронды тозаңдандыру әдісі көмегімен синтезделген мыс нанобөлшектерінің үлгілері көрсетілген. Алынған үлгілер сканерлеуші электрондық микроскопта (СЭМ) зерттелді және нанобөлшектердің өлшемдері бойынша таралуы анықталды. Эксперименттік жұмыстардың нәтижесінде, осы әдіс арқылы мыс

нанобөлшектерін синтездеген кезде оған әр түрлі параметрлер, яғни жұмыс газының қысымы және газдық разрядтың ток күші әсер ететіндігі анықталды. Шығыстағы нанобөлшектердің өлшемдері камерадағы қысым шамасын арттырғанда кішірейетіні және разряд тогының күшін арттырғанда өсетіндігі байқалды.

**Алғыс.** Бұл ғылыми зерттеу жұмысы ҚР БҒМ қолдауындағы IRN AP05134391 гранты көмегімен жүзеге асырылды.

Әдебиеттер

- 1 Lai W.T., Hwang C.J., Wang A.T., Yau J.C., Liao J.H., Chen L.H., Adachi K., Okamoto S. Etch uniformity control by gap and DC superposition at 65 nm metal hard-mask dual damascene // Proc. of the Intern. Symposium on Dry Process. Japan: Nagoya, Institute of Electrical Engineers. – 2006. – Vol. 6. – P.109-110.
- 2 Thieme M., Frenzel R., Schmidt S., Simon F., Henning A., Worch H., Lunkwitz K., Scharnweber D. Generation of Ultra-hydrophobic Properties of Aluminium – A first Step to Self-cleaning Transparently Coated Metal Surfaces // ADVANCED ENGINEERING MATERIALS – 2001. – Vol. 3. – No. 9. – P. 691–695.
- 3 Shiratani M., Kawasaki H., Fukuzawa T., Yoshioka T., Ueda Y., Singh S. and Watanabe Y., Simultaneous in situ measurements of properties of particulates in rf silane plasmas using a polarization sensitive laser light scattering method // J. Appl. Phys. – 1996. – Vol. 79. – P. 104–109.
- 4 Kersten H., Deutsch H., Stoffels E., Stoffels W. W., Kroesen G. M. W. and Hippler R. Micro-disperse particles in plasmas: From disturbing side effects to new applications // Contrib. Plasma Phys. – 2001. – Vol. 41. – P. 598–609.
- 5 Shikha Jain, Niharika Nagar and Vijay Devra. Synthesis and characterization of highly efficient copper nanoparticles and their catalytic application in oxidative kinetic study // Advances in Applied Science Research – 2015. – Vol. 6(6). – P. 171–180.
- 6 Muhammad Imran Din & Rida Rehan. Synthesis, Characterization, and Applications of Copper Nanoparticles // Analytical Letters. – 2017. – Vol. 50. – No. 1. – P. 50–62.
- 7 Galletti A.M.R., Antonetti C., Marracci M., Piccinelli F. Tellini B. Novel microwavesynthesis of Cu nanoparticles in the absence of any stabilizing agent and their antibacterial and antistatic applications // Applied Surface Science. – 2013. – Vol. 280. – P. 610–618.
- 8 Mohammad J. Hajipour, Katharina M. Fromm, Ali Akbar Ashkarran, Dorleta Jimenez de Aberasturi, Idoia Ruiz de Larramendi, Teofilo Rojo, Vahid Serpooshan, Wolfgang J. Parak and Morteza Mahmoudi. Antibacterial properties of nanoparticles // Trends in Biotechnology. – 2012. – Vol. 30. – No. 10. – P. 499–511.
- 9 Linlin Wang, Chen Hu, Longquan Shao The antimicrobial activity of nanoparticles: present situation and prospects for the future // International Journal of Nanomedicine. – 2017. – Vol. 12. – P. 1227–1249.
- 10 Hahn H. and Averback R.S. The production of nanocrystalline powders by magnetron sputtering // Journal of Applied Physics. – 1990. – Vol. 67. – P. 1113–1115.
- 11 Salavati-Niasari M., Davar F. Synthesis of copper and copper (I) oxide nanoparticles by thermal decomposition of a new precursor // Materials Letters. – 2009. – Vol. 63. – P. 441–443.
- 12 Kim Y.H., Lee D.K., Jo B.G., Jeong J.H., Kang Y.S. Synthesis of oleate capped Cu nanoparticles by thermal decomposition // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. – 2006. - Vol. 284. – P. 364–368.
- 13 Woo K., Kim D., Kim J.S., Lim S., Moon J. Ink-Jet printing of Cu– Ag-based highly conductive tracks on a transparent substrate // Langmuir. – 2009. - Vol. 25. – P. 429–433.
- 14 Park B.K., Kim D., Jeong S., Moon J., Kim J.S. Direct writing of copper conductive patterns by ink-jet printing // Thin Solid Films. – 2007. - Vol. 515. – P. 7706–7711.
- 15 Pileni M., Lisiecki I. Nanometer metallic copper particle synthesis in reverse micelles // Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Eng. Aspects. – 1993. – Vol. 80. – P. 63–68.
- 16 Safi I. Recent aspects concerning DC reactive magnetron sputtering of thin films: a review // Surface and Coatings Technology. – 2000. – Vol. 127. – P. 203–219.
- 17 Kim G.S., Kim B.S., Lee S.Y., Hahn J.H. Structure and mechanical properties of Cr-Zr-N films synthesized by closed field unbalanced magnetron sputtering with vertical magnetron sources // Surface & Coatings Technology. – 2005. – Vol. 200(5). – P. 1669–1675.
- 18 Thi My Dung Dang, Thi Tuyet Thu Le, Eric Fribourg-Blanc, and Mau Chien Dang. Synthesis and optical properties of copper nanoparticles prepared by a chemical reduction method // Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol. – 2011. – Vol. 2. – P. 015009 (6 pp).
- 19 Kapoor S., Mukherjee T. Photochemical formation of copper nanoparticles in poly (N-vinylpyrrolidone) // Chemical Physics Letters. – 2003. – Vol. 370. – P. 83–87.
- 20 Salavati-Niasari M., Davar F., and Mir N. Synthesis and characterization of metallic copper nanoparticles via thermal decomposition // Polyhedron. – 2008. – Vol. 17. – P. 3514–3518.
- 21 Dosbolayev M.K., Utegenov A.U., Ramazanov T.S. Structural Properties of Buffer and Complex Plasmas in RF Gas Discharge-Imposed Electrostatic Field // IEEE Transactions on Plasma Science. – 2016. – Vol. 44(4). – P. 469–472.
- 22 Orazbayev S.A., Ussenov Y.A., Ramazanov T.S., Dosbolayev M.K., Utegenov A.U. // Contributions to Plasma Physics. – 2015. – T. 55, №. 5. – C. 428–433.
- 23 Lisovskiy V.A., Yakovin S.D., Yegorenkov V.D. Low-pressure gas breakdown in uniform dc electric field // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2000. – Vol. 31. – P. 2722–2730.
- 24 Haberland H., Insepov Z., Kurrais M., Mall M., Moseler M., Thurner Y. Thin films from energetic cluster impact; experiment and molecular dynamics simulations // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. – 1993. – Vol. 80-81. – P. 1320–1323.
- 25 Haberland H., Mall M., Mossler M., Qiang Y., Reiners T., Thurner Y. Filling of micron-sized contact holes with copper by energetic cluster impact. Journal of Vacuum Science & Technology A. – 1994. – Vol. 12. – P. 2925–2930
- 26 Solar P., Polonskyi O., Choukourov A., Artemenko A., Biederman H., Slavinska D. Nanostructured and Nanocluster Thin Films // WDS'10 Proceedings of Contributed Papers. – 2010. – Vol. 3. – P. 36–41.

## References

- 1 W.T. Lai, C.J. Hwang, A.T. Wang, J.C. Yau, J.H. Liao, L.H. Chen, K. Adachi, and S.Okamoto, Proc. of the Intern. Symposium on Dry Process. Japan: Nagoya, Institute of Electrical Engineers, 6, 109-110 (2006).
- 2 M. Thieme, R. Frenzel, S. Schmidt, F. Simon, A. Henning, H. Worch, K. Lunkwitz, and D. Scharnweber, *Advanced engineering materials*, 3 (9), 691–695 (2001).
- 3 M. Shiratani, H. Kawasaki, T. Fukuzawa, T. Yoshioka, Y. Ueda, S. Singh and Y. Watanabe, *J. Appl. Phys.*, 79, 104–109 (1996).
- 4 H. Kersten, H. Deutsch, E. Stoffels, W.W. Stoffels, G.M.W. Kroesen and R. Hippler, *Contrib. Plasma Phys.*, 41, 598–609 (2001).
- 5 J. Shikha, N. Niharika and D. Vijay, *Advances in Applied Science Research*, 6(6), 171–180 (2005).
- 6 M. Imran Din & R. Rehan, *Analytical Letters*, 50 (1), 50–62 (2017).
- 7 A.M.R. Galletti, C. Antonetti, M. Marracci, F. Piccinelli, and B. Tellini, *Applied Surface Science*, 280, 610–618 (2013).
- 8 M.J. Hajipour, K.M. Fromm, A.A. Ashkarran, D. Jimenez de Aberasturi, I. Ruiz de Larramendi, T. Rojo, V. Serpooshan, W. J. Parak and M. Mahmoudi, *Trends in Biotechnology*, 30 (10), 499–511 (2013).
- 9 L. Wang, C. Hu, L. Shao, *International Journal of Nanomedicine*, 12, 1227–1249 (2017).
- 10 H. Hahn and R.S. Averback, *Journal of Applied Physics*, 67, 1113–1115 (1990).
- 11 M. Salavati-Niasari, F. Davar, *Materials Letters*, 63, 441–443 (2009).
- 12 Y.H. Kim, D.K. Lee, B.G. Jo, J.H. Jeong, and Y.S. Kang, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 284, 364–368 (2006).
- 13 K. Woo, D. Kim, J.S. Kim, S. Lim, J. Moon, *Langmuir*, 25, 429–433 (2009).
- 14 B.K. Park, D. Kim, S. Jeong, J. Moon, and J.S. Kim, *Thin Solid Films*, 515, 7706–7711 (2007).
- 15 M. Pileni, and I. Lisiecki, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Eng. Aspects*, 80, 63–68 (1993).
- 16 I. Safi, *Surface and Coatings Technology*, 127, 203–219 (2000).
- 17 G.S. Kim, B.S. Kim, S.Y. Lee, and J.H. Hahn, *Surface & Coatings Technology*, 200(5), 1669–1675 (2005).
- 18 Thi My Dung Dang, Thi Tuyet Thu Le, Eric Fribourg-Blanc, and Mau Chien Dang, *Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol.*, 2, 015009 (2011).
- 19 S. Kapoor and T. Mukherjee, *Chemical Physics Letters*, 370, 83–87 (2003).
- 20 M. Salavati-Niasari, F. Davar, and N. Mir, *Polyhedron*, 17, 3514–3518 (2008).
- 21 M.K. Dosbolayev, A.U. Utegenov, and T.S. Ramazanov, *IEEE Transactions on Plasma Science*, 44(4), 469–472 (2016).
- 22 S.A. Orazbayev, Y.A. Ussenov, T.S. Ramazanov, M.K. Dosbolayev, and A.U. Utegenov, *Contributions to Plasma Physics*, 55 (5), 428–433 (2015).
- 23 V.A. Lisovskiy, S.D. Yakovin, and V.D. Yegorenkov, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 31, 2722–2730 (2000).
- 24 H. Haberland, Z. Insepov, M. Kurrais, M. Mall, M. Moseler, and Y. Thurner, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 80-81, 1320–1323 (1993).
- 25 H. Haberland, M. Mall, M. Mossler, Y. Qiang, T. Reiners, and Y. Thurner, *Journal of Vacuum Science & Technology A*, 12, 2925–2930 (1994).
- 26 P. Solar, O. Polonskyi, A. Choukourov, A. Artemenko, H. Biederman, and D. Slavinska, *WDS'10 Proceedings of Contributed Papers*, 3, 36–41 (2010).

**Сәрсембек С.С.<sup>1\*</sup>, Мұсабек Г.К.<sup>1,2</sup>, Диханбаев К.К.<sup>1</sup>,  
Ермұхамед Д.<sup>1</sup>, Байганатова Ш.Б.<sup>1</sup>, Амирханова Г.А.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

<sup>2</sup>Ақпараттық және есептеуіш технологиялар институты, Қазақстан, Алматы қ.

\*e-mail: [s\\_s\\_s95@mail.ru](mailto:s_s_s95@mail.ru)

## **КЕУЕКТІ ГАЛЛИЙ ФОСФИДІ ҚАБЫҚШАЛАРЫН АЛУ ЖӘНЕ ФИЗИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІН ЗЕРТТЕУ**

Жартылайөткізгіш матеиалдардың ішіндегі А<sup>III</sup>В<sup>V</sup> қоспалар классы эффективті электрондық және фотондық құрылғыларын шығаруда кеңінен қолданылады. Заманауи жартылайөткізгіштік электроникада қолданылатын өзекті материалдардың ретінде наноөлшемді материалдар қарастырылатыны мәлім және солардың ішінде наноқұрылымды кеуекті материалдар ерекше орын алуда. Берілген мақала заманауи электроника мен фотоника салаларында болашағы зор болып танылатын материалдарының бірі – кеуекті галлий фосфидін электрохимиялық әдіспен алу және физикалық қасиеттерін зерттеудегі соңғы ғылыми-техникалық жетістіктірге шолу жасауға арналған. Жұмыста кеуекті галлий фосфидін электрохимиялық жеміру әдісімен алудың жалпы технологиясы сипатталып, процессті тиімді басқару жолдары көрсетілген, сондай-ақ, жеміру процессінің технологиялық ерекшеліктерінің түзілетін құрылымдардың физикалық қасиеттеріне әсері мен материалды қолдану аясында жасалған жаңа ұсыныстар талқыланған.

**Түйін сөздер:** кеуекті галлий фосфиді, электрохимиялық жеміру, құрылым, морфология, сканерлеуші электрондық микроскоп.

Sarsembek S.S.<sup>1\*</sup>, Mussabek G.K.<sup>1,2</sup>, Dikhanbaev K.K.<sup>1</sup>,  
Ermukhamed D.<sup>1</sup>, Baiganatova Sh.B.<sup>1</sup>, Amirkhanova G.A.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty

<sup>2</sup>Institute of Information and Computational Technologies, Kazakhstan, Almaty

\*e-mail: [s\\_s\\_s95@mail.ru](mailto:s_s_s95@mail.ru)

## **The production of porous gallium phosphide films and the investigation of physical properties**

Among a wide class of semiconductor materials, AIII BV compounds are widely used in the production of efficient electronic and photonic devices. It is known that for materials used in modern semiconductor electronics, nanoscale materials are considered to be the most relevant and nanostructured porous materials are particularly noteworthy. Recently, the interest of researchers and developers of new light-emitting structures and instruments is attracted by porous gallium phosphide, the crystal modification of which is used in the production of various predominantly green light-emitting devices. Obtaining of homogeneous and stable nanoporous structures of gallium phosphide is one of the most difficult technological problems, for the solution of which many different methods have been proposed. Among proposed methods, the electrochemical etching method proved to be the most effective to achieve positive results. Present paper is devoted to the survey of obtaining of porous gallium layers by means of electrochemical etching and of basic scientific and technical achievements in the field of research and application of its physical properties. The article describes the general technology for the production of porous gallium phosphide by electrochemical etching, discusses the technological features of controlling the etching process, discusses the influence of technological conditions for obtaining physical properties of the resulting material, and gives examples of the application of the material.

**Key words:** porous gallium phosphide, electrochemical etching, structure, morphology, scanning electron microscope.



Сарсембек С.С.<sup>1\*</sup>, Мусабек Г.К.<sup>1,2</sup>, Диханбаев К.К.<sup>1</sup>,  
Ермухамед Д.<sup>1</sup>, Байганатова Ш.Б.<sup>1</sup>, Амирханова Г.А.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Казахский национальный университет имени аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы

<sup>2</sup>Институт информационных и вычислительных технологий, Казахстан, г. Алматы  
\*e-mail: \*s\_s\_s95@mail.ru

### Получение пленок пористого фосфида галлия и исследование физических свойств

Среди широкого класса полупроводниковых материалов соединения  $A^{III}B^V$  широко используется в производстве эффективных электронных и фотонных устройств. Известно, что среди материалов, используемых в современной полупроводниковой электроники наноразмерные материалы считаются наиболее актуальными, особенно примечательны наноструктурные пористые материалы. Настоящая статья посвящена обзору получению с помощью электрохимического травления и основных научно-технических достижений в области исследования и применения физических свойств пористого фосфида галлия, одного из наиболее перспективных материалов в области современной электроники и фотоники. В статье дается описание общей технологии получения пористого фосфида галлия методом электрохимического травления, обсуждаются технологические особенности управления процессом травления, обсуждается влияние технологических условий получения на физические свойства получаемого материала, а также приведены примеры применения материала.

**Ключевые слова:** пористый фосфид галлия, электрохимическое травление, структура, морфология, сканирующий электронный микроскоп.

## 1 Кіріспе

Соңғы жылдары нанотехнология жетістіктері адам мен қоғам өмірін дамытуға үлкен септігін тигізеді. Қазіргі уақытта наноматериалдар мен нанотехнологияларды қолданатын негізгі салалар: конструкциялық және инструменталдық материалдар, өндірістік технологиялар, трибо-техника, материал беттерін қорғау, әскери іс, электр-магниттік және электрондық техника, ядролық техника, медицина мен биотехнология. Наноқұрылымды материалдардың ішінде ерекше орын алатын жартылайөткізгіштік наноматериалдар қолданыс салалардың кең спектрін қамтиды.

Электронды құрылғылардың ішінде жарық шығарушы диодтардың (ЖШД) негізіндегі технологиялар қазіргі таңдағы ең қарқынды дамып келе жатқандардың бірі деп айтуға болады. Пайдалы әсер коэффициенті (ПӘК) жоғары заманауи ЖШД негізінен  $A^{III}B^V$  жартылайөткізгіштік қоспаларының негізінде шығарылады. Олардың ішінде галлий фосфиді және оның негізіндегі наноқұрылымды материалдар жаңа ЖШД технологиясын дамыту жолындағы ғылыми зерттеулердің айқын объектісі ретінде ғалымдардың қызығушылығына ие.

Наноматериалдардың құрылымдық қасиеттерін модельдеу басқа физикалық қасиеттерін өзгертуге мүмкіншілік беретіндігі мәлім. Сондықтан құрылымдық қасиеттердің жан-жақты зерттелуі сол материалдың кең ауқымды

қолданысын табуына жол ашады. Сонымен қатар, GaP-нің көлемді кристалдық және кеуекті құрылымдық модификацияларының физикалық қасиеттерін зерттеу заманауи жартылайөткізгіштік материалтанудың өте қызықты сұрақтарының бірі болып табылады.

Осы уақытқа дейін кеуекті галлий фосфидінің құрылымдық қасиеттері жан-жақты зерттелінген. Зерттеу жұмыстарының басым көпшілігі электрохимиялық жеміру әдісімен алынған кеуекті галлий фосфидінің құрылымдық және оптикалық қасиеттерін зерттеуге арналған. Себебі, электрохимиялық жеміру әдісінің технологиясы қарапайым және тиімді болып келеді. ЭХЖ әдісінің тиімділігі наноөлшемге өткен үлгілердің құрылымын зерттеу арқылы көлемі үлкен материалдарға да қолдануға болатындығына көз жеткізілген. Яғни, бұл әдістің болашақта өндірісте қолданылуына септігін тигізеді.

## 2 Кеуекті галлий фосфидін электрохимиялық жеміру әдісімен алудың жалпы технологиясы

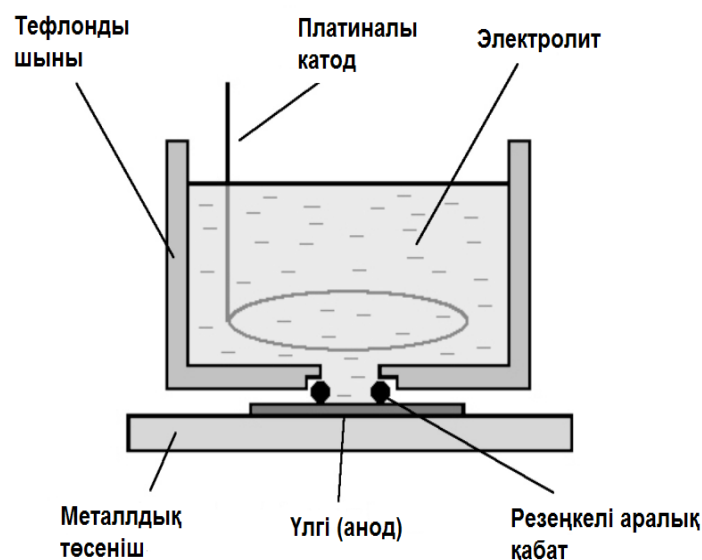
Электрохимиялық жеміру әдісі (ЭХЖ) төмен шығынды болуына және дайын құрылымдардың морфологиясын түрлендіруге мүмкіндік беруіне байланысты жартылайөткізгіштік наноматериалдарды алуда кеңінен қолданылады [1]. ЭХЖ әдісімен кеуекті кремнийді алу салдарынан, басқа да GaAs, InP и GaP [2] сияқты кеуекті

жартылайөткізгіш материалдарды зерттеуге қызығушылық туындады. Әсіресе, олардың ішінде кеуекті галлий фосфиді (por-GaP) материалы ерекше қызығушылыққа ие. Бұл оның сыну көрсеткіші мәнінің жоғары болуымен, тиімді тыйым салынған аумағының енімен тікелей байланысты. Аталған материал фотоника, оптоэлектроника және бейсызық оптика үшін болашағы зор материал болып табылады [3].

$A^{III}B^V$  тобынан кеуекті жартылайөткізгіш материалдар алудың қолайлы әдісі анодты жеміру болып табылады. Бұл әдістің артықшылығы ретінде жеміру тоғы мен уақыты, жарықтандыру, төсеніштің легирленуі секілді әмбебап параметрлер легін өзгертіп отыру арқылы түзілетін материалдың құылымын қадағалауды атауға болады. Ал бұл морфологиялары әр түрлі кеуекті

қабықшалар алуға мүмкіндік береді [4]. ЭХЖ кезінде кеуектердің пайда болу электролитке тікелей байланысты болады. Мысалы,  $H_2SO_4$ ,  $HF$  және  $HNO_3$  қышқылдары бар ерітінділерді электролит ретінде пайдаланған кезде кеуекті құрылымдардың пайда болатындығы байқалған.

Жартылайөткізгіштердегі кеуектердің пайда болуы және олардың пішіндері мен өлшемдері ЭХЖ-ның басты параметрлерінің әртүрлі комбинацияда алынған режимдерінде жүзеге асады. Жартылайөткізгіш төсеніштің бетінде кеуекті қабықшаларды дайындауда қолданылатын қондырғының қарапайым сұлбасы 1-суретте көрсетілген. Анодты жеміру кезінде жартылайөткізгіш қабықшаға оң потенциал беріледі, ал катод ретінде планиталық электрод орнатылады [5].



1-сурет – Кеуекті жартылайөткізгіш материалдарды электрохимиялық жеміру әдісімен алу сұлбасы

Осы уақытқа дейінгі зерттеу жұмыстарында ЭХЖ әдісімен әр түрлі кеуекті жартылайөткізгіштер, соның ішінде por-GaP да алынған [6]. Кеуектердің түзілуі құрамына  $HBr$ ,  $H_2SO_4$ ,  $HF$ ,  $HNO_3$  [7,8,9] сияқты қышқылдар кіретін электролиттердің қолдануымен, кернеу, ток күші және анодтау уақыттарының әр түрлі мәндерінде жүзеге асқан. Мысалы, Заварицкая Т.Н. және оның әріптестері [10] өз тәжірибелерінде кеуекті GaP қабықшаларын алу үшін қалыңдығы 300 мкм, кристалдық бағыты (100) болатын монокристалды n-типті GaP

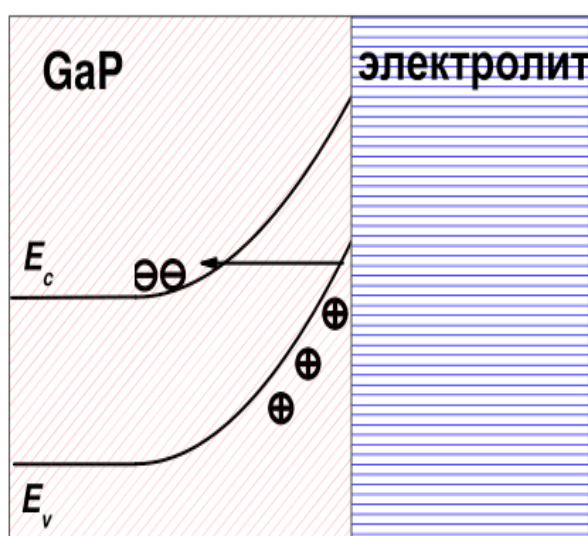
төсеніштерін қолданған. Бастапқы төсеніштердің ретінде легирлеу деңгейлері  $4-5 \cdot 10^{17}$  және  $10-20 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  аралығында болатын төрт түрі алынған. Үлгілерді анодтау үшін оларды тефлоннан жасалынған электрохимиялық ұяшықтың түбіндегі мыс пластинасына күміс шайырдың көмегімен жабыстырып бекіткен. Үлгілер беттік ауданы  $0,24 \text{ см}^2$  дөңгелек пішінді түзілімдер түрінде алынған. Электролит ретінде ортофосфор қышқылы ( $H_3PO_4$ ), сірке қышқылы ( $CH_3COOH$ ) және этил спирті ( $C_2H_5OH$ ) 1:1:2 қатынасында алынған ерітіндісі қолданылған.

Жұмыс электроды ретінде платиналық сым қолданылды. ЭХЖ процессін жүргізгенде 1-19 В аралығындағы сыртқы кернеу берілді, ток күші 2 – 10 мА және жеміру уақыты 10-30 минут аралығында болды.

Төсеніш материалдың химиялық жеміріліп, кеуектердің түзілуі электрохимиялық ұяшыққа берілген сыртқы кернеуге байланысты болады. Ең басында берілген кернеудің арқасында кристалл бетіне кеуектер енетін тесіктер саны көбейеді. Жаңадан түзілген кеуектер өзара немесе үлкен кеуектерге шоғырланады. Олар материалдың бетінде дислокация және микросызат сияқты кристаллдың ақауларын тудырады. Кеуектермен толған беттік ауданда кристаллдық

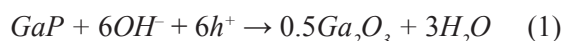
симметрияны көрсететін геометриялық пішіндер пайда болады.

ЭХЖ үдерісіндегі үлкен кернеу берілсе, ол GaP/электролит шекарасында энергетикалық деңгейдің қатты майысуына алып келеді. Нәтижесінде электрондардың валенттік аумақтан өткізгіштік аумаққа туннельденіп, галлий фосфиді қабықшасының бетінде кемтіктер көптеп пайда болады. Кемтіктер жеміру процессі кезінде белсенді қозғалып, химиялық еру үдерісінің қозғаушы күші болып табылады деп те айтуға болады (2-сурет). GaP бетінің үстінде кемтіктердің шоғырлануы беттік ауданы бойынша біртекті болғандықтан кеуекті құрылым үлгінің ішіне қарай өседі.



2-сурет – Электролитпен шекараласып жатқан галлий фосфидінің энергетикалық деңгейлерінің сұлбалық бейнесі

GaP үшін электрохимиялық диссоциация реакциясы келесі теңдеумен сипатталады:



Кеуектердің таралуы бастапқы төсеніштің кристаллдық бағыттың бойымен жүреді, себебі олардың бойында ішкі механикалық кернеуліктер жоғары және сәйкесінше химиялық байланыс әлсіз болады.

Алайда, ЭХЖ үдерісінің қарқынын жарықтың әсерімен ұлғайтуға болатыны белгілі, сондықтан кеуекті галлий фосфидін алу мәселесін зерттегенде де бұл бағытта бірқатар жұмыс атқарылды. Мысалы, келесі жұмыста [11] Чанг Жу және

әріптестері  $\text{por-GaP}$ -нің фотоэлектрохимиялық қасиеттерін зерттеген. Зерттеушілер кеуекті галлий фосфиді қабықшаларын ЭХЖ әдісімен алған. Тәжірибе барысында қалыңдығы 300 мкм, концентрациясы  $4 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  болатын күкіртпен легірілген, кристаллдық бағыты (111) болатын монокристаллды галлий фосфиді n-типті пластиналарын төсеніш ретінде қолданған. Бастапқы төсеніштерді ауданы 8 мм \* 8 мм болатын кесектерге бөлген және ЭХЖ үшін екі электродты қондырғы қолданған. Жұмыс электродтары ретінде төсеніш және графитті қолданылды. GaP төсенішінің бетін электрохимиялық жеміру құрамында 0,5 М HBr және 0,309 М  $\text{C}_2\text{H}_2\text{O}_4$  (қымыздық қышқылы) бар ерітіндіде жүргізді.

Кеуектердің төсенішке ену тереңдігін бақылау үшін ЭХЖ 0,9 А ток күшімен 15 с, 30 с, 45 с және 60 с уақыт аралығында жүргізілген. Нәтижесінде, қанық сары түсті үлгілер алынды және олардың бетінде шағын біртекті қабат пайда болды.

### **3 ЭХЖ процессінің және басқа сыртқы технологиялық жағдайлардың түзілетін кеуекті галлий фосфиді құрылымдарының физикалық қасиеттеріне әсері**

#### *3.1 Кеуекті галлий фосфидінің құрылымдық қасиеттеріне бастапқы төсеніштің параметрлерінің әсері*

Кеуекті галлий фосфидінің құрылымдық қасиеттерінің өзгерісі әртүрлі факторларға байланысты болады. Солардың бірі оның бастапқы төсенішінің параметрлеріне байланысты құрылымдық қасиеттерінің ерекшеліктері. Төсеніш параметрлеріне тәуелділігі дегеніміз біріншіден кристалды GaP төсенішінің өткізгіштік типіне (р немесе n-типті болуы мүмкін); екіншіден бастапқы төсеніштің кристалдық бағытына және легирлеу деңгейіне байланысты болады. Сонымен қатар, кеуекті галлий фосфидінің құрылымдық қасиеттерімен қоса катодолюминесценциялық қасиеттерін де зерттеуге болады. Мұндай тәжірибені Стивенс-Кальцефф және әріптестері жасаған [12]. Жұмыста кристалдық бағыты (100), n-типті Чохральский әдісімен өсірілген кристалды GaP төсеніштері қолданылған. Бастапқы төсеніштің еркін электрондар концентрациясы 300 К температурада  $5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ -ке тең болған. Анодтау үрдісі екі компонентті электрохимиялық ұяшықта жүргізілген. Анодты жеміру кезінде потенциостатикалық және гальваностатикалық режимдерде электролит ретінде 0,5 М  $\text{H}_2\text{SO}_4$  су ерітіндісі алынған. Электролитті электрохимиялық ұяшықтағы екі бөлімінен перисталдық сорғы көмегімен үздіксіз жіберіп отырған. Температура термостат арқылы 23°C мәнін тұрақты сақтаған. Электролитпен әрекеттескен үлгінің ауданы 0,12  $\text{см}^2$ -ты құраған. Түзілген құрылымдар сканерлік электрондық микроскопия (СЭМ) көмегімен зерттелінген. СЭМ бейнелері салыстыру жұмыстарын жүргізу мақсатында бірдей бөліктерден алынған.

Потенциостатикалық жағдайда сәйкесінше, 10 және 120 минут уақытта жемірілген үлгілердің СЭМ көріністерінде (3а-суреттері) кеуекті галлий фосфидінің құрылымдарын көруге болады. Екі жағдайда да үлгілер тұрақты

10 В кернеу берілгенде түзілген. Ақаулардан түзіле басталған кеуектер тоқ бойымен немесе белгілі бір кристалдық бағыт бойымен өсе бастайды. Мұндай кеуектер «бастапқы кеуектер» деп аталады. Бастапқы кеуектердің бетінде пайда болып, өсе бастаған кеуектерді «екінші ретті кеуектер» деп атайды.

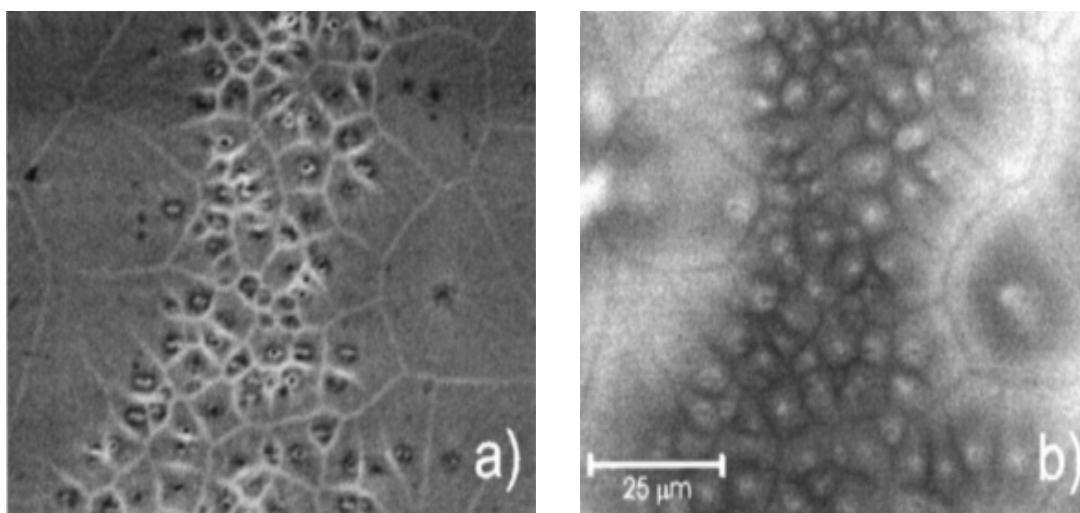
3б-суретінде үлгінің дәл сол бөлігінен алынған панхроматикалық катодолюминесценция бейнесі көрсетілген. Галлий фосфидінің кеуектілігі эмиссия тиімділігінің артуын анық көрсетеді. Суреттегі жарық аумақтар толқын ұзындығы 250-900 нм аралығында жиналаған (550 нм кезінде максималды энергиясы  $\sim 2,25$  эВ) күшейтілген люминесценция нәтижесі болып табылады. Кеуекті домендердің люминесценциясы айқын болмайды, оны 3б-суретіндегі қара сызықтардан байқауға болады.

Анодталған үлгілердің беттік аумақтарының үлкендігіне карамастан, кеуектілік КЛ-ны күшейтеді. Галлий фосфидінің кеуекті домендері КЛ-ның микроаналитикалық әдістері көмегімен визуализацияланған. Анодты жеміру жағдайларын өзгерту арқасында кеуектілік дәрежесінің және КЛ интенсивтілігінің кеңістіктегі модуляциясына бір мезгілде қол жеткізген. Тоқ тығыздығының үлкен мәнінде кеуекті қабаттарды электрондық шоғырмен қоздырған кезде сәулеленудің әлсіреуі байқалған.

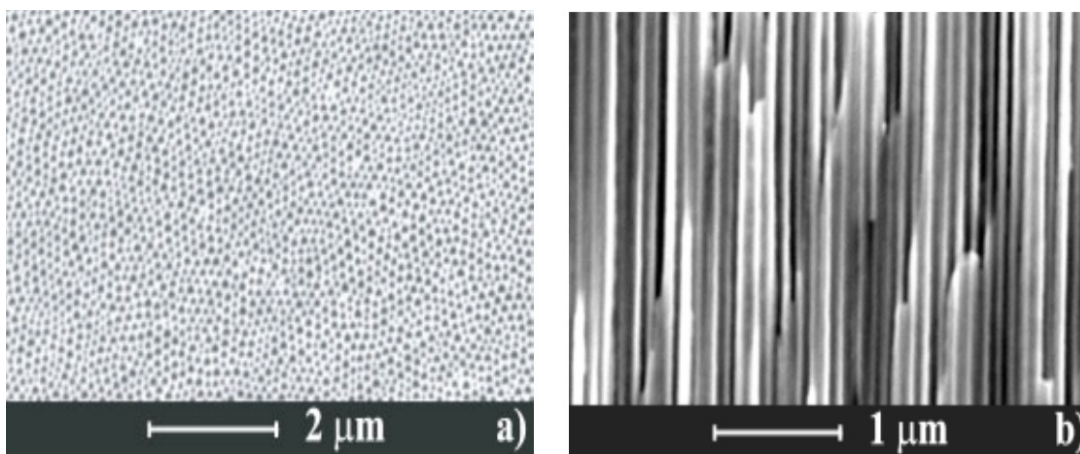
Келесі [13] жұмыстың авторлары бейсызық оптикалық материал алу мақсатында  $\text{rog-GaP}$  қабықшаларын ЭХЖ әдісімен алып, оның құрылымдық және оптикалық қасиеттерін зерттеген. Мұнда кеуектер наноталшықтар пішінді болып келген. Тәжірибе барысында n-типті кристалдық бағыты (111) болатын Чохральский әдісімен өсірілген GaP төсеніштері қолданылған. Еркін заряд тасымалдаушылардың концентрациясы 300 К температурасында  $n = 10^{18} \text{ см}^{-3}$ -не тең болған. Анодтау үдерісі HCl және  $\text{H}_2\text{SO}_4$  су ерітінділерінде жүзеге асырылған. Түзілген үлгінің ауданы 1  $\text{см}^2$ -ты құраған. Олар платинадан жасалған төрт электродтан тұратын конфигурацияны пайдаланған: 1 – жұмыс электроды; 2 – электролиттегі электрод; 3 – үлгі бетіндегі зонд-электроды; 4 – қарсы электрод. Электродтар тоқ және кернеу, сәйкесінше, 200 мА және  $\pm 80$  В дейінгі мәнді бере алатын арнайы жасалған гальваностатқа (потенциостат) қосылған. Температура термостат көмегімен 20°C мәнінде тұрақты сақтаған. Электролитті перисталдық сорғы көмегімен үздіксіз жіберіп отырған. Барлық қондырғылар компьютер арқылы басқа-

рылған. Анодтау 30 секундтан бастап 30 минутқа дейінгі уақыт аралығында өзгертіліп отырған. GaP төсеніштерінде біртекті кеуектер пайда болу үшін ультракүлгін сәулесімен жарықтандырылған. Нәтижесінде қалыңдығы 1-10 мкм болатын кеуекті қабаттар және еркін бөлінетін мембраналар алынған. Үлгілердің морфологиялық талдау-

ын СЭМ көмегімен жүргізген. Цилиндрлік емес кеуектердің пайда болуына байланысты анодты жеміру жағдайларына ерекше назар аударылған. СЭМ суреттерінде көрсетілгендей, кеуектердің көп бөлігі үшбұрышты призма пішіндес және қырынан қарағанда кеуектердің өлшемі 50-100 нм болған (4 сурет).



**3-сурет** – Тұрақты 10 В кернеуде 120 минут жеміру кезінде алынған кеуекті GaP үлгісі бетінің бейнелері. а) СЭМ және б) панхроматикалық КЛ көріністері. Микроскоп шоғының энергиясы 15 кэВ-қа, ал ток мәні 0,025 нА тең



**4-сурет** – Кеуекті GaP қабықшаларының СЭМ суреттері: а) жоғарыдан қарағандағы көрініс; б) көлденең қимасының көрінісі

Осыдан бастапқы төсеніш параметрлерінің өзгеруі түзілетін кеуекті құрылымдардың өсу қарқыны, пайда болатын пішіндері мен өлшемдерінің өзгеруіне әкеледі. Төсеніштің легирлеу деңгейі мен ішіндегі легирлеуші қоспаның түрі ЭХЖ үдерісінің жылдамдығына қатты әсер етсе,

кристаллографиялық бағыт құрылымдардың өсу бағыты мен пішінін анықтайды.

### 3.2 Кеуекті галлий фосфидінің құрылымдық қасиеттеріне электролиттің әсері

Әдетте, кеуекті галлий фосфидінің ЭХЖ әдісімен алу кезінде электролит құрамының

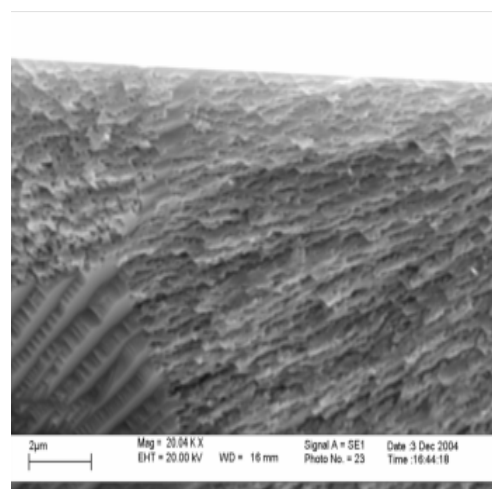
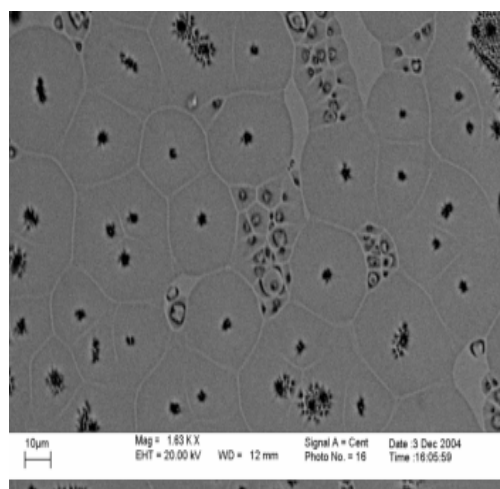
маңызы өте зор. Мысалы, [14] жұмыста кеуекті галлий фосфидін ЭХЖ әдісімен алып, оның құрылымдық қасиеттерін зерттеген. Үлгі ретінде n-типті күкіртпен легирленген GaP төсеніштерін алған. Электролит ретінде 2М HF-дың спирттегі ерітіндісін қолданған. GaP-дегі кеуектердің түзілуі айқын доменді құрылыммен сипатталған. Түзіліп жатқан доменнің орталығындағы беттік ақауларында жеміру салдарынан кеуектер түзіле бастайды. Түзілген кеуектер монокристалға тарап, өлшемі көрші домендермен шектелгенге дейін өседі. Жеміру шарттарына байланысты домен өлшемдері 5-20 мкм болған. Кернеуді арттырған сайын кеуектердің радиусы ұлғаяды. Атомдық-өрістік микроскоп (АӨМ) көмегімен алынған *pro-GaP*-нің біртектісіз (кеуектер және нанокристалдар) беттерінің өлшемі 0,05 – 1 мкм аралығында жатқандығын көруге болады [15].

Фторидті электролитте түзілген галлий фосфиді кеуектерінің құрылымы ұяшыққа берілетін кернеу мәніне тәуелді болады. Жоғары деңгейде легирленген ( $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ) кристалдарда кернеудің мәні 12 – 14 В болғанда белсенді кеу-

ек түзіледі. Сонымен қатар, кеуектердің түзілуі (100) және (110) кристалдық бағыттарының шекараларында орын алады. Ал төмен легирленген ( $10^{16} - 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ) GaP төсеніштерінен кеуекті қабықша алу үшін кернеу 20 В-тан көп болуы тиіс (5 сурет).

Жоғарыда сипатталып өткен жұмыста [13] зерттеушілер ЭХЖ жұмыс электролиті ретінде HCl және  $\text{H}_2\text{SO}_4$  негізіндегі ерітіндіні қолданған. Нәтижесінде цилиндр тәрізді квазиреттелген өлшемдері біркелкі құрылымдар түзілген (3-сурет).

Осыдан, жеміруші электролиттің ЭХЖ процессіндегі рөлі негізінен галлий және фосфор атомдарын байланыстырып, төсеніш бетінен шығару болғандықтан, оның химиялық құрамы өте маңызды. Мәселен, фосфор және галлий атомдарымен химиялық әректесуге түсетін белсенді қышқылдар ЭХЖ үдерісін қарқындаттып, пішіндері біркелкі болатын құрылымдардың түзілуіне айрықша септігін тигізеді. Осы тұрғыдан, күкірт және фтор қышқылдарының эффективтілігі зор екендігі көптеген мақалалардан көруге болады.



**5-сурет** – СЭМ көмегімен алынған кеуекті галлий фосфидінің беттік морфологиясының бейнелері ( $\text{GaP:S}$  ( $6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ), 2М HF-дың спирттегі ерітіндісі,  $U = 20 \text{ В}$ ): а) беттік қабаттың домендік құрылымы; б) үлгі кимасындағы кеуекті құрылым

### 3.3 Кеуекті галлий фосфидінің құрылымдық қасиеттеріне сыртқы электр өрісінің әсері

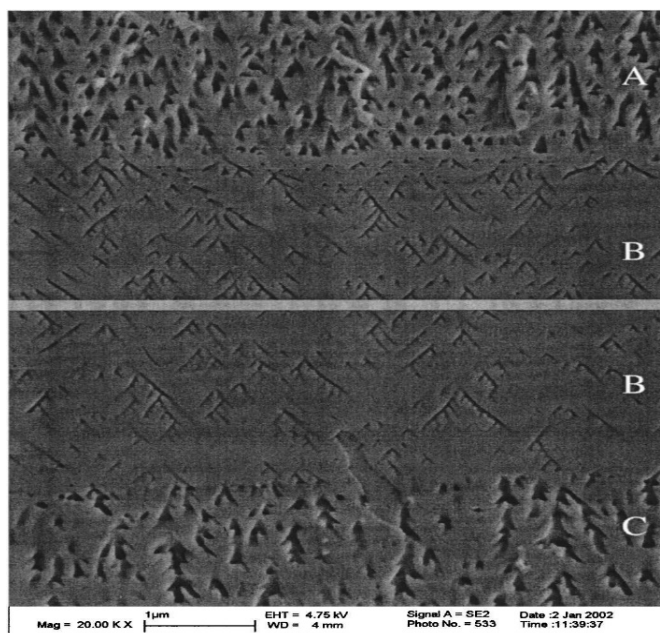
ЭХЖ үдерісінің қарқыны мен сапасы сыртқы үдеткіш электр өрісіне қатты тәуелді екендігі көптеген жұмыстардан көреміз. Сыртқы өріс берілетін кернеу мен тоқ күшімен анықталады. Сыртқы өрістің өзгеруі төсеніш материалының электролиттегі еру жылдамдығын анықтайтыны және кеуектердің өлшемдеріне септігін тигізе-

тіндігі мәлім. Осыдан, кеуектілік сыртқы берілетін өріске тәуелді деген тұжырымға келеміз. Сондықтан, әртүрлі кернеулер мен тоқ күші берілген кезде құрылымдары және сәйкесінше оптикалық және электрондық қасиеттері бөлек материалдар түзілетіндігі айқын.

Алайда, құрылымы тек бір қабатты кеуекті галлий фосфидімен қатар көп қабатты құрылымын да алуға болады. Мұндай тәжірибені

Теркстра және оның әріптестері жасаған [16]. Тәжірибеден алынған кеуектердің пішіндері көпқабатты кристалл тәріздес болған. 6-суретте кеуекті қабаттардың көлденең қимасының СЭМ бейнесі көрсетілген. Кеуектілігі әртүрлі үш қабат 11,4 В (А қабаты), 7,0 В (В қабаты) және 10 В (С қабаты) потенциалдары мәндерінде жемірілген. А қабатында кеуектердің диаметрлері  $73 \pm 18$  нм және С қабатындағы кеуектердің диаметрлері  $81 \pm 22$  нм, бұл В қабатындағы кеуектердің диаметрлерімен  $41 \pm 9,5$  нм салыстырғанда әлдеқайда үлкен. В қабатындағы кеуектер кристаллографиялық осьтің бойында пайда болған. Мұндай құбылыс жоғарыда аталған Стивенс-Кальцефф және оның әріптестері жүргізген тәжірибеде де байқалған. Нәтижелер көрсеткендей кеуектердің өлшемі және

кеуектілікке берілген потенциал арқасында бақылана алады. Сонымен қатар, жемірілген қабықшаның кеуектілігі легірлеуші қоспаның тығыздығына және потенциалына байланысты болған. Легірлеуші қоспаның тығыздығы  $10 - 20 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  және потенциалы 7,4 В болатын қабықшаны қолданған кезде кеуектілік 66% – ға жеткен. Бұл тәжірибеде электрод белсенді және белсенді емес күйлер арасында алдыға және артқа кезетесіп беріліп отырған. Сол себепті, циклді түрде түзу сканерлеу кезіндегі пайда болған оксид кері сканерлеген кезде жойылған. СЭМ нәтижелері циклге сәйкес келетін көпқабатты құрылымды көрсетіп тұр. Оксидтердің түзілу (ақ жолақтар) кеуекті қабаттардың арасындағы өтпелі аймақтарда анық көрінген.



**6-сурет** – Қоспа тығыздығы  $6 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$  болатын екі көпқабатты GaP қабықшаларының көлденең қималарының СЭМ бейнесі

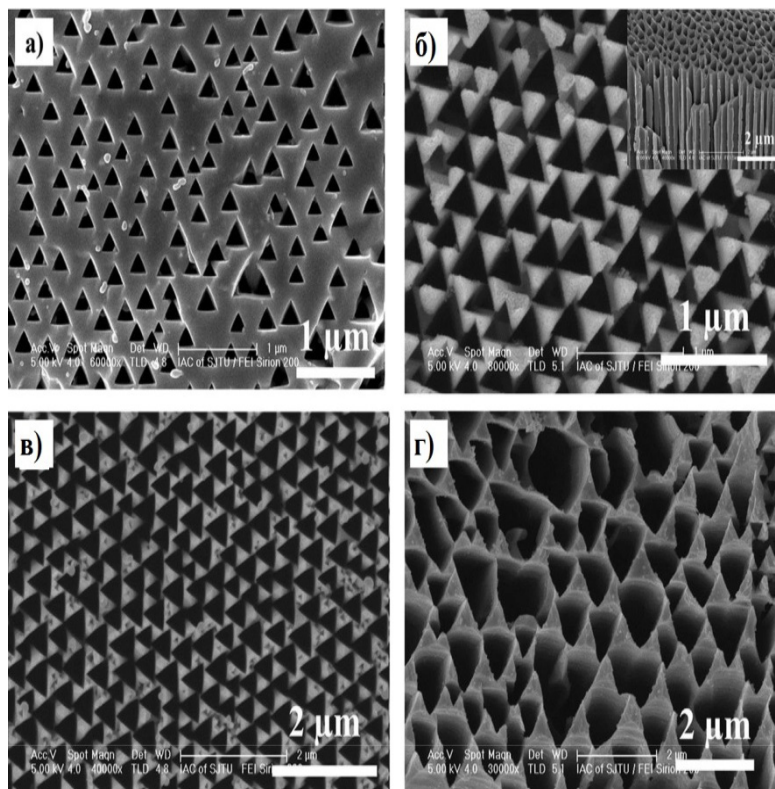
Қорыта келгенде, ЭХЖ үдерісі кезінде берілетін сыртқы өрістің қуаты түзілетін құрылымының кеуектілігін, яғни ең басты құрылымдық идентификациялық параметрін анықтайды деген тұжырым жасаймыз. Неғұрлым сыртқы өріс қуаты жоғары болса, материалдың кеуектілігі соғұрлым жоғары болады. Сондықтан, кеуекті материалдың физикалық қасиеттерін өзгерту үшін ең алдымен ЭХЖ үдерісінің сыртқы өрісін өзгерту керек.

#### 3.4 Кеуекті галлий фосфидінің құрылымдық қасиеттеріне жеміру уақытының әсері

Por-GaP қабықшасында пайда болған кеуектер түрлі технологиялық жағдайда алынғандықтан құрылымдардың пішіндері мен өлшемдері өзгеше болып келетіндігі анықталған. Кеуектердің пішіндері ұсақ тесіктер, пирамида тәрізді, жіпшелер тәрізді немесе кристалл тәрізді болуы мүмкін [17,18]. Мысалы, жоғары аталған Чанг Жу және әріптестері жүргізген тәжірибеде

[11] кеуектер үшбұрышты, пирамида тәріздес болып шыққан. Өртүрлі жеміру уақытында алынған кеуекті GaP СЭМ бейнелері 7-суретте көрсетілген. Суреттен жеміру уақыты 15 с құраған кезде өте көп, үлкен үшбұрышты кеуектер түзілгендігін көруге болады. 7а-суретінде көрсетілгендей, пирамида пішінді кеуектердің орташа өлшемі 215 нм, ал анодтау уақыты екі есе ұзарғанда (7б-суретінен) орташа өлшемдері

300 нм болатынына көз жеткізуімізге болады. Егер жеміру уақытын 30 с-ке дейін ұлғайтсақ кеуектердің тереңдігі 35 мкм-ге жетуі мүмкін. Жеміру жылдамдығы шамамен 1,2 м/с-ті құрайды. Үшбұрышты кеуектердің көлденең қимасын 7б-суретіндегі қосымша суреттен көруге болады. 7с және 7д-суреттерінде жеміру уақыты сәйкесінше 45 с және 60 с болатын кеуекті GaP морфологиясы көрсетілген.



7-сурет – Өртүрлі уақыт аралығында жемірілген үшбұрышты porous-GaP-нің құрылымы.

а) жеміру уақыты 15 с болатын кеуекті құрылымның СЭМ бейнесі.

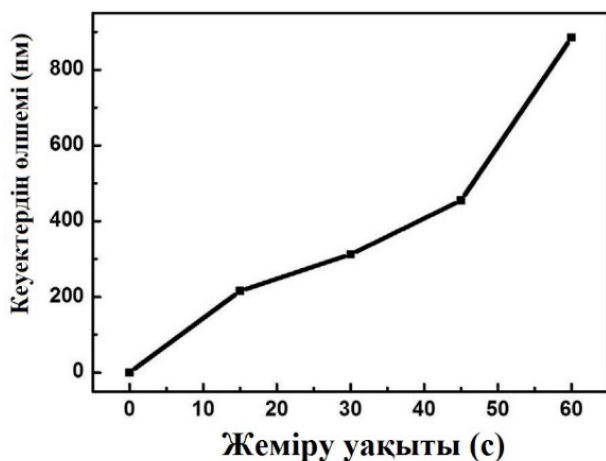
б) жеміру уақыты 30 с кеуекті GaP-нің құрылымдық морфологиясы.

Қосымша суретте көлденең қимасы көрсетілген. в) жеміру уақыты 45 с-ке жеткенде кеуектердің мөлшері көбейген. г) кеуектер жеміру уақыты 60 с-ке жеткенде бұзыла бастаған

Porous-GaP тұрақты таралған үшбұрышты және түзу кеуектерден құралатындығын анықтауға болады. Құрылымдық қасиеттерін зерттей отырып, қабықшалардың түзілу жылдамдығын және әсер етуші факторларды анықтауға болады. Мысалы, 8-суретте кеуектер өлшемдерінің жеміру уақытына тәуелділік графигі келтірілген. Жеміру уақыты 60 с-тан асканда үшбұрышты кеуектердің құрылымдары бұзылып, шеткі бөліктері жойыла бастайды. Осылайша, жеміру уақытына байланысты кеуектер өлшемдерінің ұлғайғатындығына көз жеткізуге болады. Гра-

фиктен көріп отырғанымыздай, кеуектердің өлшемдерінің қарқынды өсуі жеміру уақыты 15 секундқа дейін жүрген. Кеуектердің өлшемі 200 нм-ді құраған. Жеміру уақыты 15-45 секунд аралығында кеуектердің өлшемдерінің өсуі баяулайды. Жеміру уақыты 45 секундқа жақындағанда кеуектердің өлшемі шамамен 450 нм болды. Ал 45-60 секунд аралығында қайтадан кеуектердің өлшемдері қарқынды түрде ұлғаяды. Үлгілердің беті 60 секунд жемірілген кезде, кеуектердің өлшемі 800 нм шамасына жеткен [19].





8-сурет – Кеуектер өлшемдерінің жеміру уақытына тәуелділік графигі

Сипатталған мәліметтерден ЭХЖ уақыты кеуекті галлий фосфиді жұқа қабықшаларының қалыңдығын бақылап, керекті өлшемдерге дейін жеткізуге қол жеткізетін маңызды фактор екендігін түсінеміз. Химиялық реакцияның ұзақтығы, сонымен қатар, құрылымның ішкі біртектілігіне де әсерін тигізеді, сондықтан, әрбір процесстің өзіндік тәжірибеден анықталатын шекті уақыты болады. Теориялық тұрғыдан шекті ЭХЖ уақытын анықтау өте қиын болатыны көрінеді, себебі айнымалы параметрлер саны көп.

#### 4 Кеуекті галлий фосфидінің заманауи қолданысы

1960 жылдан бастап галлий фосфидінен қарапайым жарық шығарушы диодтар жасалынады. Алғашқы ЖШД-тардың кемшілігі жоғары температураға аса сезімтал және жоғары тоқ тығыздығына байланысты жарықтық эмиссияның жылдам деградацияға ұшырауы болып табылатын. Сондықтан GaP гетероқұрылымды материалдарда жиі қолданған [20].

Таза галлий фосфидінен жасалған ЖШД толқын ұзындығы шамамен 555 нм-ге тең жасыл түсті сәуле таратады [21]. ЖШД жасыл түсті жарық шығаратынына көз жеткізу үшін қарапайым ғана есеп шығарсақ болады. GaP тыйым салынған аумағының ені 2,26 эВ-қа ( $3,62 \cdot 10^{-19}$  Дж) тең. Электрон материалдың өткізгіштік аумағынан валенттік аумағына өткен кезде тыйым салынған аумақтың энергиясы фотон энергиясына сәйкес келеді [22].

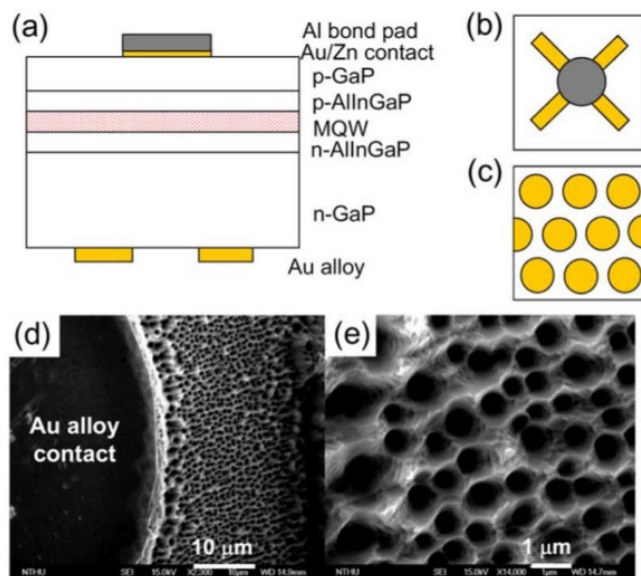
Қазіргі таңда заманауи технологиялар қарқынды дамып келе жатыр. Күн батареяларында, сенсорикада және медицинада қолданылатын аспаптар, жарық шығарушы диодтар, оптикалық, тіпті ғарыштық аспаптардың барлығы жартылайөткізгіш материалдың қолданылуымен жасалады [23].

rog-GaP нанокұрылымдары заманауи электрондық техниканы оңтайландыру және функционалдық дамыту жолындағы ізденістерге арналған ұсыныстардан кездестіруіміз әбден мүмкін. Мысалы, мұндай құрылымдарды эффективтілігі еселенген ЖШД құрамында қолдануды [24] жұмыстың авторлары ұсынған. Олардың тәжірибелерінде n-типті нанокеуекті GaP қабаттары фотоэлектрхимиялық жеміру әдісімен алынған. Үлгілердің кеуектерінің диаметрлері 300-700 нм құраған және олар үлгінің бетінде біртекті  $1,2 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$  тығыздықпен таралған болатын. Мұндай кеуекті беттік құрылым үшін анықталған көрінетін аралық фотондарының орташа жүгіріп өту жылдамдығы ұзындығының төмендігі AlGaInP негізіндегі қызыл жарық шығарушы диодындағы фотондардың шашырауын күшейтетіні табылған. Кеуекті GaP жабындысы бар ЖШД активті қабатының жарық шығару эффективтілігі ондай жабындысы жоқ аспаптармен салыстырғанда 30% – 50% жоғары. Төмендегі 9 суретте rog-GaP беткі жабындысы бар AlGaInP жарық шығарушы диоды құрылымының сұлбасы және кеуекті материалдың СЭМ бейнелері келтірілген.

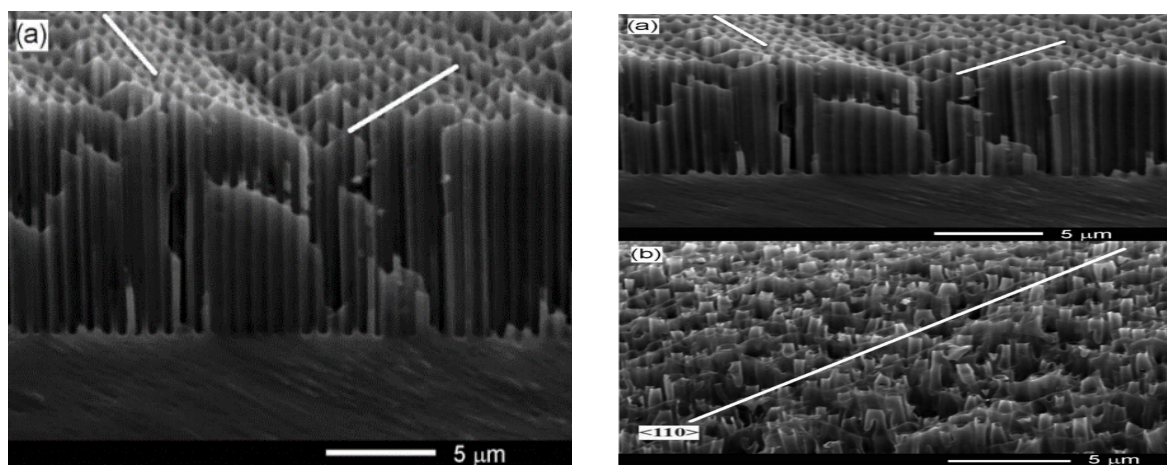
Ал келесі жұмыстың авторлары [25] металмен қапталған rog-GaP жұқа қабықшаларын электроникалық және фотоникалық қолданыстар үшін төсеніш ретінде пайдалануды ұсынды. Тигиняну және әріптестері кеуекті галлий және платина негізіндегі екі өлшемді металл – жартылайөткізгіштік қаңқаларды алудың жолын сипаттаған. Ол үшін біріншіден ЭХЖ әдісімен өлшемдері микрон және субмикрон аралығында жататын параллель орналастқан кеуектері бар rog-GaP қабаттарын ЭХЖ әдісімен қалыптастырған. Содан соң, импульсті гальваникалық отырғызу әдісімен кеуектердің ішіне платина түйіршіктерін отырғызған. Нәтижесінде Pt/rog-GaP Шоттки диодтарының негізінде стандартты аспаптармен салыстырғанда сыйымдылық тығыздығының өзгеру коэффициенті жоғары болатын конденсаторлық аспап құрылған. Төмендегі 10 суретте тәжірибелік ізденістерде туындаған аспапта қолданылған нанокұрылымдарының

СЭМ бейнелері келтірілген. Зерттеу авторлары өздерінің жұмысында металл түйіршіктерін жартылайөткізгіш матрицаға гальваникалық отырғызудың нәтижесінде пайда болатын құрылымдарды сыйымдылығы айнымалы аспаптар

жасауда пайдалануды ұсынып отыр. Әсіресе, сыйымдылық тығыздығы кернеудің өте аз өзгерістеріне сезімтал болатын аспаптар және фотондық элементтердің фокустау жүйелерін әзірлеу үшін өте тиімді екенін айтады.



**9-сурет** – AlGaInP негізіндегі жарық шығарушы диодының сұлбалық көрінісі: а) ЖШД көлденең қимасының жалпы көрінісі, б) ЖШД құрылымының жоғарыдан қарағандағы бейнесі, с) ЖШД құрылымының астынан қарағандағы бейнесі, д) кеуекті n-GaP бетінің СЭМ бейнесі, е) алтын қоспасының Омдық контактілерінің арасындағы СЭМ бейнесі



**10-сурет** – Кеуектер массивтері реттелген пор-GaP төсенішінің СЭМ бейнелері: а) реттелу бағыттары ақ сызықтарымен көрсетілген және б) квазиреттелген екі өлшемді Pt нанотүтікшелерінің бейнесі. б) суретіндегі ақ сызық нанотүтікшелердің GaP кристаллындағы (110) бағытының бойымен орналасу бағытын көрсетіп тұр

## Қорытынды

Қортындылай келгенде, мақалада берілген физикалық қасиеттерге ие болатын кеуекті галлий фосфиді құрылымдарын алудың тиімді әдістерінің бірі электрохимиялық жеміру әдісі жан – жақты ашылып қарастырылды. Түзілетін кеуекті құрылымдардың пішіндері мен орналасу тәртіптеріне, кеуектілігіне электрохимиялық жеміру процессінің және басқа да сыртқы технологиялық факторлардың тигізетін әсерлері жайында жүргізілген зерттеулердің нәтижелеріне шолу жасалынды. Сонымен қатар, мақалада электрохимиялық жеміру әдісімен алынатын кеуекті галлий фосфиді қабықшалары-

ның электроникалық және фотоникалық қолданыстарда пайдаланудың айқын мысалдыры келтірілген. Осыдан, заманауи технологиялық аспап жасауда галлий фосфидінің басқа жартылайөткізгішті материалдарға мықты бәсекелес материал болатынына көз жетізуге болады. Сонымен қатар, болашақта қазіргі зерттеу жұмыстары қалаушы құрал ретінде алынуы әбден мүмкін. Мақалада келтірілген ақпаратты пайдалана отырып, электрохимиялық жеміру әдісімен алынатын кеуекті галлий фосфиді қабықшаларының физикалық қасиеттерін алдын ала болжап, пайдалану мақсатына қарай берілген физикалық қасиеттерге ие болатындай етіп алуға болады деп қорытынды жасаймыз.

## Әдебиеттер

- 1 Treideris M., Simkiene I., Selskis A., Balevicius Z., Babonas G. J. Electrochemical formation and microstructure of porous gallium phosphide // *Acta Physica Polonica*. – 2011. – V. 119. – No. 2. – P. 131-134.
- 2 Shen Y.C., Hon M.H., Leu I.C., Teoh L.G. Morphological characterization of porous GaP prepared by electrochemical etching // *Applied Physics*. – 2010. – P. 429-434.
- 3 Treideris M., Simkiene I., Kasalynas I., Selskis A., Babonas G. J. Infrared reflectance of GaP nanorods // *Lithuanian Journal of Physics*. – 2011. – V. 51. – No. 4. – P. 341 – 344.
- 4 Sutherland R. *Handbook on Nonlinear Optics*. – New York: Marcel Dekker, 2013. – P 685.
- 5 Улин В.П., Конников С.Г. Природа процессов электрохимического порообразования в кристаллах АПВ. Часть I. // *Физика и техника полупроводников*. – 2007. – Т. 41. – Вып. 7. – С. 854-866.
- 6 Tjerkstra R. W. Electrochemical formation of porous GaP in aqueous HNO<sub>3</sub> // *Electrochem Solid-State Letters*. – 2006. – V. 9. – No. 81. – P. 81- 84.
- 7 Mel'nikov V. A., Golovan L. A., Konorov S. O., Muzychenko D. A., Fedotov A. B., Zheltikov A. M., Timoshenko V. Yu., Kashkarov P. K. Second-harmonic generation in strongly scattering porous gallium phosphide // *Appl. Phys. B*. – 2004. – V. 79, No. 2. – P. 225 – 228.
- 8 Зотеев А. В., Кашкаров П. К., Образцов А. Н., Тимошенко В. Ю. Электрохимическое формирование и оптические свойства пористого фосфида галлия // *Физика и техника полупроводников*. – 1996. – Т.30. – Вып.8. – С.1473-1478.
- 9 Katsuhiko T., Sadao A. Structural and photoluminescence properties of porous GaP formed by electrochemical etching // *Journal of applied physics*. – 2005. – V. 98. – No. 073511. – P. 1-7.
- 10 Заварицкая Т. Н., Караванский В. А., Квит А. В., Мельник Н. Н. Исследования структуры пористого фосфида галлия // *Физика и техника полупроводников*. – 1998. – Т. 32. – Вып. 2. – С. 235-240.
- 11 Zhu Ch., Zheng M., Xiong Z., Li H., Shen W. Electrochemically etched triangular pore arrays on GaP and their photoelectrochemical properties from water oxidation // *International journal of hydrogen energy*. – 2014. – V. 05. – No. 022. – P. 10861-10869.
- 12 Stevens-Kalceff M. A., Tiginyanu I. M., Langa S., Föll H., Hartnagel H. L. Correlation between morphology and cathodoluminescence in porous GaP // *Journal of Applied Physics*. – 2001. – V. 89. – No. 5. – P. 2559-2565.
- 13 Tiginyanu I. M., Kravetsky I. V., Langa S., Marowsky G., Monecke J., Föll H. Porous III–V compounds as nonlinear optical materials // *Phys. stat. sol.* – 2003. – V. 197. – No. 2. – P. 549–555.
- 14 Белогорохов А. И., Караванский В. А., Образцов А. Н., Тимошенко В. Ю. Интенсивная фотолюминесценция в пористом фосфиде галлия // *Письма в ЖЭТФ*. – 1994. – Т. 60. – Вып. 4. – С. 274-278.
- 15 Головань Л. А., Мельников В. А., Коноров С. О., Федотов А. Б., Гаврилов С. А., Желтиков А. М. Эффективная генерация второй гармоники при рассеянии в пористом фосфиде галлия // *Письма в ЖЭТФ*. – 2003. – Т. 78. – Вып. 3-4. – С. 229-233.
- 16 Tjerkstra R. W., Gomez Rivas J., Vanmaekelbergh D., Kelly J. J. Porous GaP multilayers formed by electrochemical etching // *Electrochemical and Solid-State Letters*. – 2002. – V. 5. – No. 5. – P. 32-37.
- 17 Standing A., Assali S., Lu Gao, Verheijen M. A., Dick van Dam, Cui Y. Efficient water reduction with gallium phosphide nanowires // *Nature communications*. – 2015. – V. 6. – No. 7824. – P. 1-7.
- 18 Bussian D.A., Crooker S.A., Yin M., Brynda M., Efros A.L., and Klimov V.I. Tunable magnetic exchange interactions in manganese-doped inverted core-shell ZnSe–CdSe nanocrystals // *Nature Mater*. – 2009. – V. 8. – No. 1. – P. 35-40.
- 19 Dasgupta N.P., Yang P. Semiconductor nanowires for photovoltaic and photoelectrochemical energy conversion // *Front. Phys.* – 2014. – V. 9. –No. 1. – P. 289-302.

- 20 Радауцан С. И., Максимов. Ю. И., Негрескул В. В., Пышкин С. Л. Фосфид галлия. – Кишинев: АН МССР. Ин-т прикл. Физики, 1969. – 123 с.
- 21 Matthew M., Aaron C. H., Paul E. B. Cavity optomechanics in gallium phosphide microdisks // *Applied Physics Letters*. – 2014. – V. 104. – No. 141104. – P. 1-5.
- 22 Singh S., Srivastava P. Optical properties of gallium phosphide (GaP) nanowires // *Applied Nanoscience*. – 2013. – V. 3. – No. 2. – P. 89–94.
- 23 Marvin J. W., Handbook of optical materials. – California: CRC Press, 2003. – 499 p.
- 24 Hwang J. M., Hung W. H., Hwang H. L. Efficiency enhancement of light Extraction in LED With a Nano-Porous GaP Surface // *IEEE Photonics technology letters*. – 2008. – V. 20. – No. 8. – P. 608-610.
- 25 Tiginyanu I., Monaico E., Sergentu V., Tiron A. and Ursakia V. Metallized porous GaP templates for electronic and photonic applications // *ESC Journal of Solid State Science and Technology*. – 2015. – V. 4. – No. 3. – P. 57-62.

#### Refereces

- 1 M. Treideris, I. Simkiene, A. Selskis, Z. Balevicius and G.J. Babonas, *Acta Physica Polonica* 119, 131-134 (2011).
- 2 Y.C. Shen, M.H. Hon, I.C. Leu and L.G. Teoh, *Applied Physics* 98, 429-434 (2010).
- 3 M. Treideris, I. Simkiene, I. Kasalynas, A. Selskis and G.J. Babonas, *Lithuanian Journal of Physics* 51, 341 – 344 (2011).
- 4 R. Sutherland, *Handbook on Nonlinear Optics*, (Marcel Dekker, New York, 2013), 685 p.
- 5 V.P. Ulin and S.G. Konnikov, *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* 7, 854-866 (2007). (in Russ).
- 6 R.W. Tjerkstra, *Electrochem and solid-state letters* 9, 81-84 (2006).
- 7 V.A. Mel'nikov, L.A. Golovan, S.O. Konorov, D.A. Muzychenko, A.B. Fedotov, A.M. Zheltikov, V.Yu. Timoshenko and P.K. Kashkarov, *Appl. Phys* 79, 225–228 (2004). A.V. Zoteyev, P.K. Kashkarov, A.N. Obraztsov and V.Yu. Timoshenko, *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* 8, 1473-1478 (1996). (in Russ).
- 8 K. Tomioka and S. Adachia, *Journal of Applied Physics* 98, 1-7 (2005).
- 9 T.N. Zavaritskaya, V.A. Karavanskiy and A.V. Kvit, *Fizika i tekhnika poluprovodnikov* 2, 235-240 (1998). (in Russ).
- 10 Ch. Zhu, M. Zheng, Z. Xiong, H. Li and W. Shen, *International journal of hydrogen energy* 39, 10861-10869 (2014).
- 11 M.A. Stevens-Kalceff, I.M. Tiginyanu, S. Langa, H. Föll and H.L. Hartnagel, *Journal of Applied Physics* 89, 2559-2565 (2001).
- 12 I.M. Tiginyanu, I.V. Kravetsky, S. Langa, G. Marowsky, J. Monecke and H. Föll, *Applied Research* 194, 549–555 (2003).
- 13 A.I. Belogorokhov, V.A. Karavanskii, A.N. Obraztsov and V.Yu. Timoshenko, *Pisma v ZHETF* 60, 274-278 (1994). (in Russ).
- 14 L.A. Golovan, V.A. Mel'nikov, S.O. Konorov, A.B. Fedotov, S.A. Gavrilov, A.M. Zheltikov, P.K. Kashkarov, V.Yu. Timoshenko, G.I. Petrov, L.Li and V.V. Yakovlev, *Pisma v ZHETF* 78, 229-233 (2003). (in Russ).
- 15 R.W. Tjerkstra, J.R. Gómez, D.A.M. Vanmaekelbergh and J.J. Kelly, *Electrochemical and solid-state letters* 5, 32 – 35 (2002).
- 16 A. Standing, S. Assali, G. Lu, M.A. Verheijen, and Y. Cui, *Nature communications* 6, 1-7 (2015).
- 17 D.A. Bussian, S.A. Crooker, M. Yin, M. Brynda, A.L. Efros, and V.I. Klimov, *Nature Mater.* 8, 35-40 (2009).
- 18 N.P. Dasgupta and P. Yang, *Front. Phys.* 9, 289-302, (2014).
- 19 S.I. Radautsan, Yu.I. Maksimov, V.V. Negreskul and S.L. Pyshkin, *Fosfid galliya* (Kishinev: AN MSSR. In-t prikl. Fiziki, 1969), 123 p. (in Russ).
- 20 M. Matthew, C.H. Aaron and E.B. Paul, *Applied Physics Letters* 104, 1-5 (2014).
- 21 S. Singh and P. Srivastava, *Applied Nanoscience* 3, 89–94 (2013).
- 22 J.W. Marvin, *Handbook of optical materials*, (CRC Press, California, 2003), 499 p.
- 23 J.M. Hwang, W.H. Hung and H.L. Hwang, *IEEE Photonics Technology Letters* 20, 608-610 (2008).
- 24 I. Tiginyanu, E. Monaico, V. Sergentu, A. Tiron and V. Ursakia, *ESC Journal of Solid State Science and Technology* 4, 57-62 (2015).

**Zhanturina N.\*, Aimaganbetova Z., Sagimbaeva Sh.**

K. Zhubanov Aktobe Regional State University,  
Kazakhstan, Aktobe, \*e-mail: nzhanturina@mail.ru

### **ABOUT THE ORIGIN OF THE EMISSION BANDS IN THE WAVELENGTH RANGE 320-600 NM IN KBR CRYSTAL AT LOW TEMPERATURES**

In this paper the results of the registering of X-ray luminescence spectra of KBr crystal at the temperature range 10-325 K were presented. The spectrum of X-ray crystal KBr is composed of three bands – at ~ 280 nm (~ 4.44 eV) ~ 340 nm (~ 3.65 eV) and ~ 490 nm (~ 2.54 eV). The peak at 490 nm –  $\pi$ -luminescence from the triplet state excitons. In article the temperature dependence of this band was explained by the theory of excitons self-trapping. The luminescence intensity of this band increases to 25 K then decreases. We have modeled by the continual theory that the potential barrier height of excitons self-trapping is minimal at a temperature of 25 K. So the theory confirms with experiment. The band at 280 nm eV –  $\sigma$  – luminescence from the singlet state exciton, reaches its maximum at low temperatures. The nature of the band at 340 nm eV is associated with the creation of excitons with more “symmetric” configuration than «strong-off».

**Key words:** exciton, KBr, band, luminescence, temperature dependence, configuration, self-trapping.

Жантурина Н.Н.\*, Аймаганбетова З.К., Сагимбаева Ш.Ж.

Қ. Жұбанов атындағы Ақтөбе өңірлік мемлекеттік университеті,  
Қазақстан, Ақтөбе қ. \*e-mail: nzhanturina@mail.ru

#### **Төменгі температураларда КВг кристалында 320-600 нм интервалында жарқырау жолағының табиғаты туралы**

Бұл мақалада КВг кристалының 10-325 К температуралық диапазонында рентгендік люминесценция спектрін тіркеуінің нәтижелері келтірілген. КВг кристалының рентгендік люминесценция спектрі үш жолақтан тұрады: ~ 280 нм (~ 4.44 эВ), ~ 340 нм (~ 3.65 эВ) және ~ 490 нм (~ 2,54 эВ). 490 нм-дегі шың –  $\pi$ -люминесценцияға сәйкес. Мақалада осы жолақтың температуралық тәуелділігі экситондардың автолокализациясы теориясымен түсіндіріледі. Бұл жолақтың люминесценциясының интенсивтілігі 25 К-ге дейін артады, содан кейін азаяды. Экситондардың қармалу бөгетін әртүрлі температурада модельдеу нәтижесінде, биіктігі 25 К температура кезінде минималды болып келеді. Осылайша, теория экспериментпен расталады.

**Түйін сөздер:** экситон, КВг, жолақ, люминесценция, температуралық тәуелділік, конфигурация, автолокализация.

Жантурина Н.Н.\*, Аймаганбетова З.К., Сагимбаева Ш.Ж.

Актюбинский региональный государственный университет им. К. Жубанова,  
Казakhstan, г. Актөбе, \*e-mail: nzhanturina@mail.ru

#### **О происхождении полосы излучения в интервале 320-600 нм в кристалле КВг при низких температурах**

В настоящей работе представлены результаты регистрации спектров рентгенолюминесценции кристалла КВг в интервале температур 10-325 К. Спектр рентгенолюминесценции кристалла КВг состоит из трех полос – при ~ 280 нм (~ 4,44 эВ), ~ 340 нм (~ 3,65 эВ) и ~ 490 нм

( $\sim 2,54$  эВ). Пик при 490 нм –  $\pi$ -люминесценция экситонов из триплетного состояния. В статье температурная зависимость этой полосы объясняется теорией автолокализации экситонов. Интенсивность люминесценции этой полосы возрастает до 25 К, а затем уменьшается. В результате моделирования процесса автолокализации экситонов при различных температурах высота потенциального барьера экситонов минимальна при температуре 25 К. Таким образом, теория подтверждается экспериментом.

**Ключевые слова:** экситон, KBr, полоса, люминесценция, температурная зависимость, конфигурация, автолокализация.

## Introduction

Alkali halide crystals (AHC) are members of a broad class of scintillation and dosimetric materials, in which the action of radiation, especially X-ray, is the emergence of electronic excitations relaxed, subsequently, on the radiative and nonradiative channels [1, 2]. The radiation relaxation of AHC is caused by the self-trapping of excitons in regular lattice sites due to the exciton-phonon interaction. It depends on different factors, among them are impurities, hydrostatic and uniaxial pressure, point defects [3]. The consequences of nonradiative relaxation are creation of F-centers, H-centers and other defects and their complexes. In AHC the bands of absorption characteristic for most of defects are widely researched [4]. The result of radiative annihilation during the exciton self-trapping in regular lattice sites is the luminescence. Studies of the luminescence of AHC under different conditions allows to determine the nature of the emission bands, as well as the annihilation of electron excitations and their interaction with defects [5]. Recently, besides alkali halide crystals are used as a scintillation materials, dosimetric materials, optical medium and simply model objects for many theoretical researches, their clusters became useful for the creation of batteries or as an ideal gas phase models for sea salt aerosols, which are essential components of atmospheric chemistry in marine regions. In this field the Infrared multiple photon dissociation is interesting method [6]. Recently, theoretical studies of the energy of electronic excitations in various states allow us to determine many characteristics of scintillation detectors, optical devices based on alkali halide crystals. For example, in the works, the binding energies of LiF clusters were calculated and this made it possible to determine the durability of lithium fluoride batteries [7,8].

It is known that the nature of the luminescence of AHC is radiation dihalogen self-trapped exciton (STE) by reducing the mean free path monohalogen exciton. With increasing temperature, the intensity of the luminescence is quenched by the exciton transition from a free state to a self-localized [9,10].

In the study of X-ray spectra of alkali halide crystals at low temperatures, special attention was paid to the nature and regularity of the main emission in the area of  $\sim 280$  nm ( $\sim 4.44$  eV), which contribute to the integral luminescence of AHC, but has not yet been thoroughly studied spectra with low intensity ranges  $\sim$  wavelengths 320-360 nm ( $\sim 3,88$ - $3,45$  eV) and  $\sim 450$ - $560$  nm ( $\sim 2,76$ - $2,22$  eV) at temperatures from 10 to 85 K. A study changes in the intensity of these peaks can give information on the nature of the electronic excitations in AHC. Also, there was an interest to study the spectra of X-ray crystal KBr in connection with the discovery of the effect of the creation of excitons with "more symmetric" configuration in comparison with «strong-off» under the influence of uniaxial elastic compression up to 1.2% in AHC [11].

## Samples

Samples of crystal KBr, used in the work were grown at the Institute of Physics of the University of Tartu in Estonia. A complex method comprising the steps of purification and cultivation of AHC:

1. Cleaning the original crystals from oxygen-containing impurities and OH;
2. Cleaning of the original crystals with impurities homologues zone melting method;
3. The multiple zone-refining of polyvalent metals in vacuum and subsequent cultivation in a vial at its passage of the last zone or again growth by Kyropoulos method in a helium atmosphere [12].

KBr crystals were obtained from the zone-refined raw materials by Kyropoulos in a helium atmosphere. This crystal was subjected to 60-fold zone melting. The impurity content of  $10^{-6}$ - $10^{-8}$  and atmospheric admixture of Rb in the amount of  $10^{-5}$  [13].

## Experiment

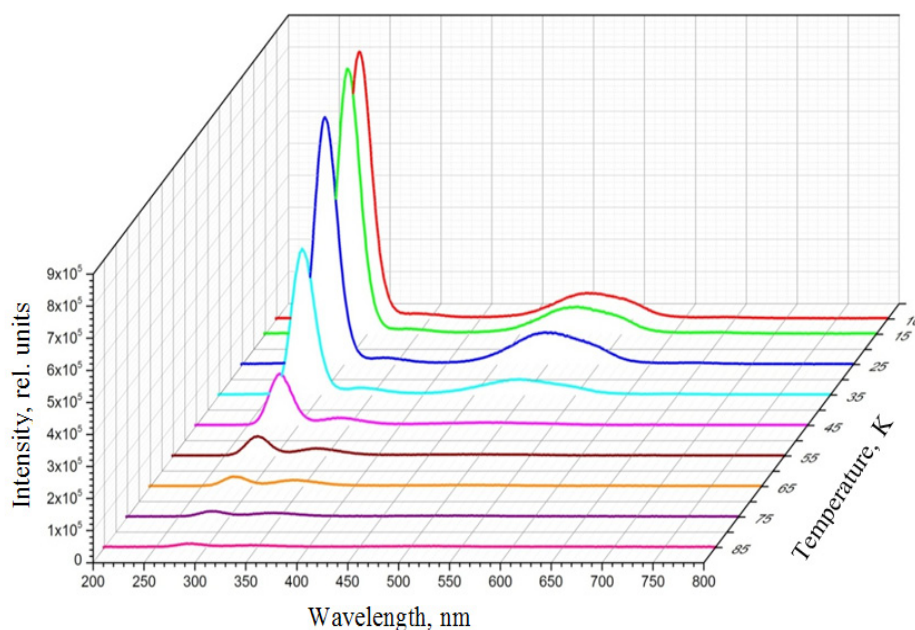
The experiment was done in the Nicolaus Copernicus University in Torun.

X-ray source series «Inel» with a copper anode allows for a maximum voltage of 60 kV. Operating

voltage / current during the experiment was 45 kV / 10 mA. The X-ray generator has a water cooling system, his work is automated. With the help of cryogenic helium cooling apparatus with temperature controller 330 LakeShore possible to control the temperature from 10 to 325 K. The data are processed by a special program, the files are saved in ASCII [14,15].

As can be seen from Fig. 1, the spectrum of X-ray crystal KBr is composed of three bands – at

$\sim 280$  nm ( $\sim 4.44$  eV)  $\sim 340$  nm ( $\sim 3.65$  eV) and  $\sim 490$  nm ( $\sim 2.54$  eV). It is known that the peak at 2.54 eV –  $\pi$ -luminescence from the triplet state excitons, at 4.44 eV –  $\sigma$  – luminescence from the singlet state exciton, reaches its maximum at low temperatures [16]. Intensity of  $\sigma$  – luminescence reaches its maximum at low temperatures and quenched starts at high temperature (Fig. 1). So, at 80 K, the intensity of the  $\sigma$  – emission is approximately 50 times weaker than that at 25 K (Fig. 1).



**Figure 1** – The spectrum of X-ray crystal KBr in the temperature range 10-85 K

Temperature dependences of the intensities of the emission bands at  $\sim 340$  nm ( $\sim 3.65$  eV) and  $\sim 490$  nm ( $\sim 2.54$  eV) are shown in Fig. 2, 3.

The intensity of the luminescence of KBr at 340 nm is clearly observed at temperatures of 10-65 K and is in a high-energy part of the spectrum than the  $\pi$ -luminescence. Its intensity increases with temperature up to 50 K. Then, the intensity of this band begins to decrease.

Let's consider the nature of the band at 490 nm. There are passport details of this band that it corresponds to the radiation of self-trapped exciton [17]. And, for the  $\pi$ -emission of KBr released the following pattern: as the temperature increases from 10 K, the intensity starts to increase to a temperature near 30 K, and then decreases. This experimental result confirms our excellent model of self-trapping of excitons depending on the temperature [18].

## Discussion

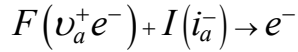
Analyzing the possible mechanisms of emission in KBr crystal at low temperatures and taking into account the results of studies of the luminescence of alkali halide crystals obtained under the influence of uniaxial strain, we formulate our arguments.

Apparently, the nature of the band at 340 nm is associated with the creation of excitons with more "symmetric" configuration than «strong-off», because:

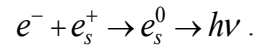
- Radiation occurs in the high part of the spectrum than the  $\pi$ -emission;
- Under the influence of uniaxial stress in alkali halide crystals excitons with more "symmetric" configuration than the «strong-off» are created, and the impact of uniaxial strain is similar to the effects of low temperatures;

– In the literature is indicated recombination luminescence mechanism at low temperatures in crystals with a high yield of radiation defect formation [19];

– It is shown that at low temperatures the  $I$  – centers recombine with electron centers ( $F$  – centers) by the scheme:



resulting in recombination luminescence of STE.



– Increase in the intensity of the luminescence to a temperature of approximately 50 K with its further decrease indicates the presence of a barrier for self-trapping of excitons to create STE of more “symmetric” configuration than «strong-off» [20].

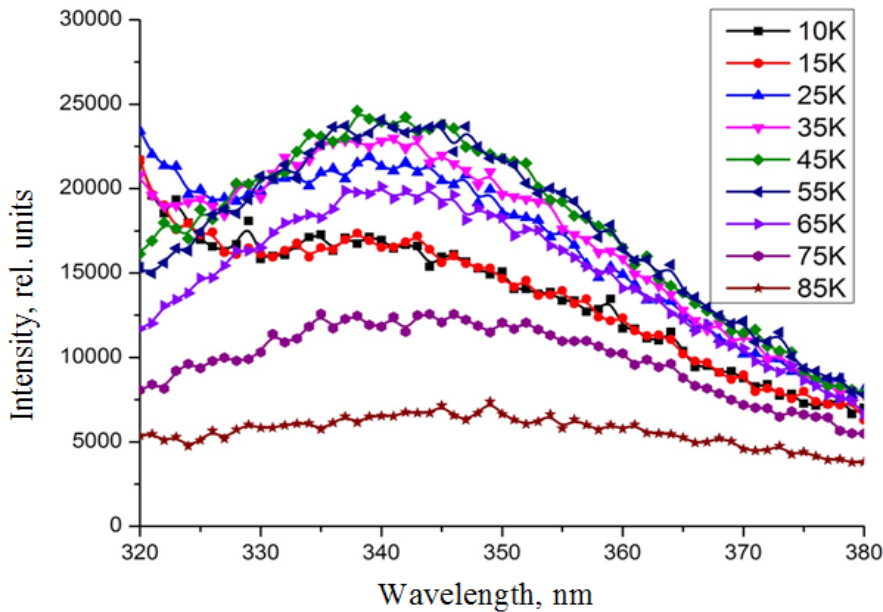


Figure 2 – Temperature dependence of the luminescence band at ~ 340 nm (3.65 eV) in KBr crystal

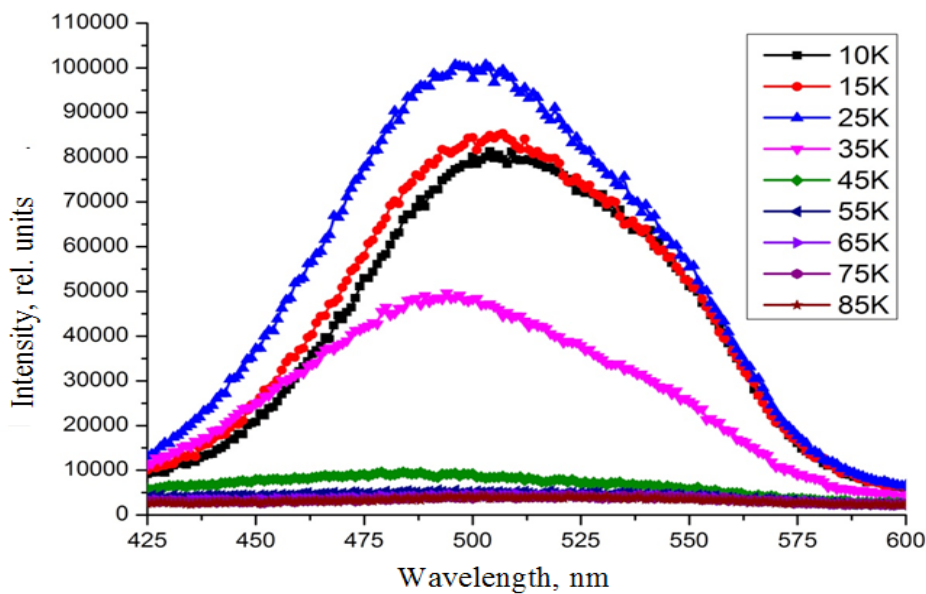


Figure 3 – Temperature dependence of the luminescence band at ~ 490 nm (~ 2.54 eV) in KBr crystal



However, since the radiation of STE occurs in KBr at 340 nm is apparently created STE with different configuration compared to «strong-off».

As for the patterns of change in the intensity of the luminescence band with the temperature at 490 nm, it can be argued that the luminescence intensity increases during the transition to self-trapped exciton state, this corresponds to a temperature of about 25 K, and then after the process of self-trapping of excitons the intensity of  $\pi$ - emission begins to fade.

In the simulation, the temperature dependence of the height of the potential barrier trapping of excitons in crystals KI, KBr based on the adiabatic potentials methods was found that the potential barrier has a minimum in KBr crystal at a temperature of about 25 K, in crystal KI – about 65 K. Here highlights of this theoretical investigation [21].

The nature of the changes the potential barrier height of self-trapping of excitons can be analyzed on the surfaces of the adiabatic potential (AP) excitons in alkali halide crystals:

$$E(\mu) = A\mu^2 - B\mu^3 - C\mu, \quad (1)$$

where  $\mu$  is a variational parameter, varying from 0.1 to 1 and equal to the ratio of the lattice constant to the radius of the area of self-trapping of the exciton,

$$A = \frac{3\pi\hbar^2}{2m_h^*a_0^2}, \quad B = \frac{E_d^2}{2\beta a_0^3}, \quad C = \frac{e^2}{\tilde{\epsilon}a_0}$$

determine respectively the kinetic energy of the exciton energy relaxation of the lattice, and the lattice polarization (the interaction of holes with optical lattice vibrations) [9]. The energy difference between the maximum and minimum of the expression is the height of the potential barrier of self-trapping of excitons [22, 23].

In the simulation, the temperature dependence of the height of the potential barrier of self-trapping of excitons we took into account two main factors – a lattice vibrations and changes in the lattice constant, which is part of every member in the functionality of the adiabatic potential. Lattice vibrations affect the kinetic energy of an exciton, resulting in a decrease of the quantity  $D = \sqrt{2Bk_B T}$ , which is called the fluctuation potential [24].

The temperature dependence of the lattice constant in a first approximation, we find the

following. At sufficiently low temperatures, when the energy of thermal motion  $k_B T$  much smaller than the width of the exciton band  $A$  majority of excitons located in the wave vector space, with increasing temperature change of the wave vector of the exciton, and its deviation from the initial value  $\chi$  can be found by the following formula:

$$k = k_0 - \chi. \quad (2)$$

Considering the non-degenerate exciton gas electron gas [25] applying the law of conservation of energy Boltzmann statistics, the deviation of the wave vector of the initial value can be written as the following expression:

$$\chi = \frac{j}{\hbar} \sqrt{3mk_B T}, \quad (3)$$

where  $j$  is parameter depending on the thermal effects on or interatomic bond distances. For alkali crystals it ranges from 0.01 to 0.1.

Using expressions (2), (3) the temperature dependence of the lattice constant is written as

$$a = \frac{a_0 \hbar \sqrt{\pi}}{\hbar \sqrt{\pi} - a_0 j \sqrt{mk_B T}}, \quad (4)$$

where  $a_0$  is lattice constant at 4,2 K.

So, by the expression  $E(\mu) = (A - D)\mu^2 - B\mu^3 - C\mu$  we built the adiabatic potential surface excitons in KBr crystals at different temperatures.

As can be seen from this figure the potential barrier reaches a minimum at a temperature of about 25 K in the crystal KBr. Consequently, in KBr crystal near 25 K the luminescence intensity reaches its maximum with further quenching.

For crystal KI, for example, it is known  $x$ -shaped luminescence intensity of self-trapped excitons dependence on temperature, which confirms our theoretical results. For crystal KBr the intensity of the luminescence of self-trapped excitons on temperature has not been studied in detail experimentally due to the fact that this crystal is not effective scintillator.

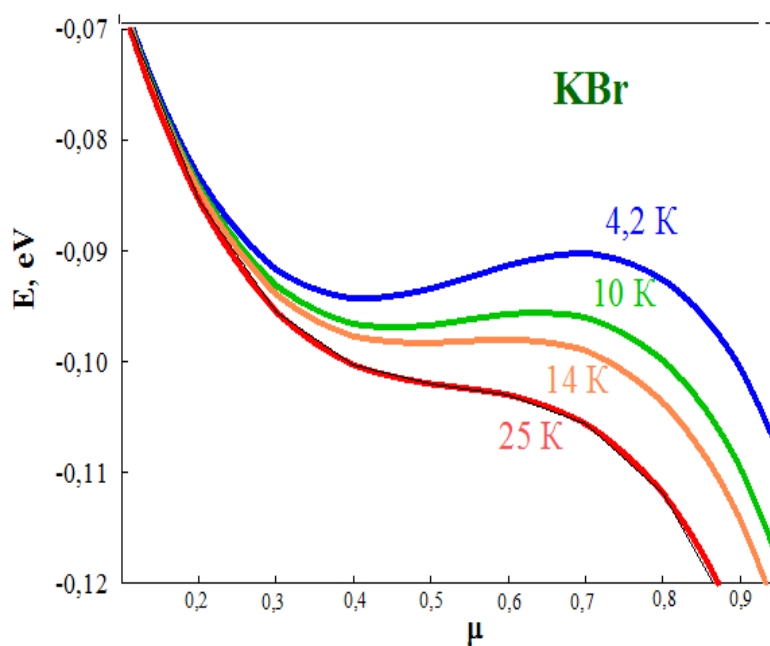


Figure 4 – Adiabatic potential surfaces of excitons in KBr at different temperatures

## Conclusion

Thus, as a result of experimental study of X-ray luminescence spectra in KBr crystal in temperature range 10-90 K, we obtained the following findings:

1) The spectrum of X-ray luminescence of KBr crystal at low temperatures was studied and the nature of the luminescence band with a maximum at 340 nm was interpreted, which intensity increases to a temperature of about 50 K, the nature of which corresponds to the emission of self-trapped exciton with more “symmetric” configuration than «strong-off», created using the tunneling charge of radiation defects at low temperatures.

2) The effect of increasing the luminescence intensity of self-trapped excitons in KBr crystal (490 nm) to about 25 K, corresponding to the temperature at which the potential barrier of excitons self-trapping reaches a minimum value, has been experimentally discovered and theoretically interpreted.

The results obtained by measuring the X-ray spectra in alkali halide crystals at low temperatures allow us to explain the connection between the self-trapping of excitons and the intensity of the luminescence, efficiency of radiation defect formation as well as to explain the regularities of luminescence by the theory of electronic excitations.

## References

- 1 Lushchik Ch.B., Lushchik A.Ch. The decay of electronic excitations with the formation of defects in solids. – Moscow: Nauka, 1989. – 263 p. (in Russ.).
- 2 Myasnikova L.N. Luminescence and exciton-phonon interaction in alkali halide crystals at low temperature deformation. – Aktobe, 2018. (in Russ.).
- 3 Barmina A.A. Luminescence and radiation defect creation in alkali halide crystals at lattice symmetry lowering. – Aktobe, 2018. (in Russ.).
- 4 Sagimbaeva Sh.Zh. The technology of the ionizing radiation energy transformation mechanism controlling in alkali-halide crystals scintillators. – Aktobe, 2018. (in Russ.).
- 5 Shunkeyev K., Sergeyev D., Drozdowski W., Brylev K., Myasnikova L., Barmina A., Zhanturina N., Sagimbaeva Sh., Aimaganbetova The deformation stimulated luminescence in KCl, KBr and KI crystals // Journal of Physics: Conference Series. – 2017. – Vol.830, No 1. – P.012139.
- 6 Heller J., Ončák M., Bersenkovitsch N.K., van der Linde C., Beyer M.K. Infrared multiple photon dissociation of cesium iodide clusters doped with mono-, di- and triglycine // Eur J Mass Spectrom (Chichester). – 2018. – Oct 4:1469066718803307.

- 7 Leung K., Lin, Y-X., Liu Z., Chen L-Q., Lu P., Qi Y. Connecting the irreversible capacity loss in Li-ion batteries with the electronic insulating properties of solid electrolyte interphase (SEI) components // *J. Power Sources*. – 2016. – Vol. 309. – P. 221–230.
- 8 Fan L., Zhuang H., Gao L., Lu Y., Archer L., Regulating Li deposition at artificial solid electrolyte interphases // *J. Mater. Chem. A*. – 2017. – Vol. 5. – P. 3483–3492.
- 9 Shunkeyev K., Myasnikova L., Barmina A., Zhanturina N., Sagimbaeva Sh., Aimaganbetova Z. and Sergeev D. The thermostimulated luminescence of radiation defects in KCl, KBr and KI crystals at elastic and plastic deformation // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2017. – Vol. 830. – P. 012138.
- 10 Shunkeyev K., Zhanturina N., Myasnikova L., Sergeev D., Aimaganbetova Z., Sagimbaeva Sh., Barmina A., Ubaev Zh. The nature of luminescence of KI and KI-Na crystals at low temperature deformation after natural decrease in the symmetry of the lattice // *Eurasian Journal of Physics and functional Materials*. – 2018. – Vol. 2, No3. – P. 267-273.
- 11 Lushchik A., Lushchik Ch., and Vasil'chenko E. Radiation creation of cation defects in alkali halide crystals: Review and today's concept (Review Article) // *Low Temp. Phys.* – 2018. – Vol. 44, Iss.4. – P. 269-277.
- 12 Shunkeyev K., Sergeev D., Myasnikova L., Barmina A., Shunkeyev S., Zhanturina N., Aimaganbetova Z. Vacancy Dipole Currents of Thermostimulated Depolarization in a Plastically Deformed KCl Crystal // *Russ. Phys. J.* – 2014. – Vol. 57, Iss. 4. – P. 451–458.
- 13 Behr A., Peisl H., Waidelich W. Thermal annealing of low-temperature X-irradiated KCl // *Phys.Lett. A*. – 1967. – Vol. 24, Iss.7. – P.379–380.
- 14 Drozdowski W., Brylew K., Sławomir M., Kaczmarek B., Piwowarska D., Nakai Y., Tsuboid T. Huang W Studies on shallow traps in Li<sub>2</sub>B<sub>4</sub>O<sub>7</sub>:Eu,Mn // *Rad. Meas.* – 2014. – Vol. 63. – P.26-31.
- 15 Kantorski I., Jurkowski J., Drozdowski W. Observed light yield of scintillation pixels: Extending the two-ray model // *Opt. Mat.* – 2016. – Vol. 59. – P.91-95.
- 16 Babin V., Bekeshev A., Elango A., Kalder K., Shunkeyev K., Vasilchenko E., Zazubovich S. Effect of uniaxial stress on dynamics of electronic excitations in alkali halides // *J. of Luminescence*. – 1998. – Vol.76&77. – P.502–506.
- 17 Karasawa T. and Hirai M. Intrinsic Luminescence in KBr Crystals between 1.8 K and 80 K // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1976. – Vol.40. – P.12-133.
- 18 Zhanturina N., Shunkeyev K. The rate of the exciton self-trapping in KI and RbI at different temperatures // *JOP: Conference series*. – 2012. – Vol.400. – P.052045.
- 19 Tomiki T., Miyata T., Tsukamoto H. Temperature Dependence of the Fundamental Spectra of Potassium-Halides in the Schumann Ultraviolet Region (4.4–13.5 eV) // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1973. – Vol.35. – P.495–507.
- 20 Lushchik A., Lushchik Ch., Kirm M., Nagirnyi V., Savikhin F., Vasil'chenko E. Defect creation caused by the decay of cation excitons and hot electron hole recombination in wide-gap dielectrics // *Nucl. Instr. and Meth.* – 2006. – Vol.250 (1-2). – P. 330-336.
- 21 Tanaka K., Kan'no K., Nakai Y. Lattice Relaxation of Self-Trapped Excitons in Binary Mixed Crystals of KCl and KBr // *J. of the Physical Society of Japan*. – 1990. – Vol. 59. – P. 1474–1487.
- 22 Shunkeyev K., Zhanturina N., Myasnikova L., Aimaganbetova Z., Barmina A., Sagymbaeva Sh., and Sergeev D. The specifics of radiative annihilation of self-trapped excitons in a KI-Tl crystal under low-temperature deformation // *Low temperature physics*. – 2016. – Vol. 42. – P. 580-583.
- 23 Israel B.-J. Excitons in two-dimensional electron gas // *Chemical physics*. – 2005. – Vol. 318. – P. 99-103.
- 24 Sirdeshmukh D., Sirdeshmukh L., Subhadra K. Alkali Halides. – Springer-Verlag, 2001; Toyozawa Y. Elementary processes in luminescence // *J. of Luminescence*. – 1976. – Vol. 12. – P. 13-21.
- 25 Aboltin D., Grabovskis V., Kangro A., Lushchik Ch., O'Konnell-Bronin A., Vitol I., Zirap V. Thermally stimulated and tunneling luminescence and frenkel defect recombination in KCl and KBr at 4.2 to 77 K // *Phys. Stat. Sol.* – 1978. – Vol. 47. – P.667–675.

## References

- 1 Ch.B. Lushchik, A.Ch. Lushchik, The decay of electronic excitations with the formation of defects in solids, (Moscow: Nauka, 1989), 263 p. (in Russ.).
- 2 L.N. Myasnikova, Luminescence and exciton-phonon interaction in alkali halide crystals at low temperature deformation, (Aktobe, 2018). (in Russ.).
- 3 A.A. Barmina Luminescence and radiation defect creation in alkali halide crystals at lattice symmetry lowering, (Aktobe, 2018). (in Russ.).
- 4 Sh.Zh. Sagimbaeva, The technology of the ionizing radiation energy transformation mechanism controlling in alkali-halide crystals scintillators, (Aktobe, 2018). (in Russ.).
- 5 K. Shunkeyev, D. Sergeev, W. Drozdowski, K. Brylew, L. Myasnikova, A. Barmina, N. Zhanturina, Sh. Sagimbaeva, Aimaganbetova, *Journal of Physics: Conference Series*, 830 (1), 012139 (2017).
- 6 J. Heller, M. Ončák, N.K. Bersenkovitsch, C. van der Linde, M.K. Beyer, Oct 4, 1469066718803307 (2018).
- 7 K. Leung, Y-X. Lin, Z. Liu, L-Q.Chen, P. Lu, Y. Qi, *J. Power Sources*, 309, 221–230 (2016).
- 8 L. Fan, H. Zhuang, L. Gao, Y. Lu, L. Archer, *J. Mater. Chem. A*, 5, 3483–3492 (2017).
- 9 K. Shunkeyev, L. Myasnikova, A. Barmina, N. Zhanturina, Sh. Sagimbaeva, Z. Aimaganbetova and D. Sergeev, *JOP: Conference Series*, 830, 012138 (2017).

- 10 K. Shunkeyev, N. Zhanturina, L. Myasnikova, D. Sergeyev, Z. Aimaganbetova, Sh. Sagimbaeva, A. Barmina, and Zh. Ubaev, *Eurasian Journal of Physics and functional Materials*, 2 (3), 267-273 (2018).
- 11 A. Lushchik, Ch. Lushchik, and E. Vasil'chenko, *Low Temp. Phys.*, 44 (4), 269-277 (2018).
- 12 K. Shunkeyev, D. Sergeyev, L. Myasnikova, A. Barmina, S. Shunkeyev, N. Zhanturina, and Z. Aimaganbetova, *Russ. Phys. J.*, 57 (4), 451– 458 (2014).
- 13 A. Behr, H. Peisl, and W. Waidelich, *Phys. Lett. A* 24 (7), 379–380 (1967).
- 14 W. Drozdowski, K. Brylew, M. Slawomir, B. Kaczmarek, D. Piwowarska, Y. Nakai, T. Tsuboid and W. Huang *Rad. Meas.*, 63, 26-31 (2014).
- 15 I. Kantorski, J. Jurkowski, and W. Drozdowski, *Opt. Mat.*, 59, 91-95 (2016).
- 16 V. Babin, A. Bekeshev, A. Elango, K. Kalder, K. Shunkeyev, E. Vasilchenko, and S. Zazubovich, *J. of Luminescence*, 76&77, 502–506 (1998).
- 17 T. Karasawa and M. Hirai, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 40, 12-133 (1976).
- 18 N. Zhanturina, and K. Shunkeyev, *JOP: Conference series*, 400, 052045 (2012).
- 19 T. Tomiki, T. Miyata, and H. Tsukamoto, *J. Phys. Soc. Jpn.*, 35, 495– 507 (1973).
- 20 A. Lushchik, Ch. Lushchik, M. Kirm, V. Nagirnyi, F. Savikhin, and E. Vasil'chenko, *Nucl. Instr. and Meth.*, 250 (1-2), 330-336 (2006).
- 21 K. Tanaka, K. Kan'no, and Y. Nakai, *J. of the Physical Society of Japan*, 59, 1474–1487 (1990).
- 22 K. Shunkeyev, N. Zhanturina, L. Myasnikova, Z. Aimaganbetova, A. Barmina, Sh. Sagymbaeva, and D. Sergeyev, *Low temperature physics*, 42, 580-583 (2016).
- 23 B.-J. Israel, *Chemical physics*, 318, 99-103 (2005).
- 24 D. Sirdeshmukh, L. Sirdeshmukh, and K. Subhadra, *Alkali Halides*, (Springer-Verlag, 2001); Y. Toyozawa, *J. of Luminescence*, 12, 13-21 (1976).
- 25 D. Aboltin, V. Grabovskis, A. Kangro, Ch. Lushchik, A. O'Konnell-Bronin, I. Vitol, V. Zirap, *Phys. Stat. Sol.*, 47, 667–675 (1978).

**Насурлла Маулен, Буртебаев Н., Мукашев К.М.\*,  
Насурлла Маржан, Ходжаев Р.А.**

НИИЭТФ, Казахский национальный университет им. аль-Фараби, Казахстан, г. Алматы  
Институт ядерной физики МЭ РК, Казахстан, г. Алматы  
\*e-mail: mukashev.kms@gmail.com

## **ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО РАЗРЕШЕНИЯ ДЕТЕКТОРА ИЗ АРСЕНИДА ГАЛЛИЯ**

В работе приводятся результаты исследования детектора, выполненного по технологии газофазной эпитаксии из арсенида галлия особой чистоты (VPE GaAs). Энергетическое разрешение детектора 52 КэВ. Для всех исследуемых детекторов эффективность сбора заряда от самых длиннопробежных частиц выходит на максимум при напряжении 60 В. При нулевом смещении эффективность сбора заряда для энергий альфа-частиц от 4.8 до 7.7 МэВ находится в пределах от 74 до 58 %. Эти данные свидетельствуют о возможности использования разработанных детекторов в режиме счета частиц без внешнего смещения с высокой эффективностью сбора заряда в качестве сенсора протонов отдачи при регистрации быстрых нейтронов. Детектор сохраняет спектрометрические качества до температуры порядка 110°C при одновременном увеличении рабочего смещения до 110–130 В. Дальнейшее повышение температуры до 130°C приводит к катастрофическому ухудшению характеристик детектора.

**Ключевые слова:** нейтрон, альфа-частица, арсенид галлия, детектор, сенсор, регистрация, характеристики, заряд, эффективность сбора, фотолитография.

Nassurlla Maulen, Burtebayev N., Mukhashev K.M.\*,  
Nassurlla Marzhan, Khojayev R.A.

IETP, Al-Farabi Kazakh National University, Kazakhstan, Almaty  
Institute of Nuclear Physics ME RK, Kazakhstan, Almaty  
\*e-mail: mukashev.kms@gmail.com

### **Temperature dependence of the energy resolution of a gallium arsenide detector**

The paper presents the results of the study of the detector, made by gas-phase epitaxy technology of high purity gallium arsenide (VPE GaAs). The energy resolution of the detector is 52 KeV. For all detectors under study, the efficiency of charge collection from the longest-running particles reaches a maximum at a voltage of 60 V. At zero offset, the charge collection efficiency for alpha-particle energies from 4.8 to 7.7 MeV ranges from 74 to 58%. This data show the possibility of using the developed detectors in the particles counting mode without external offset with high collection efficiency as a sensor of recoil protons for detecting fast neutrons. Detector saves spectrometric qualities to a temperature of 110 °C while increasing the operating offset to 110-130 V. A further increase in temperature to 130 °C leads to a catastrophic degradation of detector characteristics.

**Key words:** neutron, alpha particle, gallium arsenide, detector, sensor, registration, characteristics, charge, collection efficiency, photolithography.

Насурлла Мәулен, Бүртебаев Н., Мұқашев Қ.М.\*,  
Насурлла Маржан, Ходжаев Р.А.

ЭТФФЗИ, әл-Фараби ат. Қазақ Ұлттық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

<sup>1</sup>Ядролық физика институты, Қазақстан, Алматы қ.

\*e-mail: mukashev.kms@gmail.com

### Галлий арсенидінен жасалған детектордың энергетикалық шешуші қабілетінің температураға тәуелділігі

Жұмыста тазалығы айрықша жоғары, газифазалық эпитаксия технологиясы бойынша галлий арсенидінен жасалған (VPE GaAs) детекторды зерттеу нәтижелері баяндалады. Детектордың энергетикалық шешуші қабілеті 52 кэВ құрады. Жүру жолы мейлінше ұзақ саналатын ядролық бөлшектер үшін детекторлардың ығыстырушы кернеу 60 В кезінде зарядты жинақтау тиімділігі максимумға жетіп үлгереді. Ығыстырушы кернеу нольге тең болса және альфа-бөлшектердің энергиясы 4.8–7.7 МэВ аралығында өзгерген жағдайда, детектордың зарядты жинақтау тиімділігі (74–58)% аралығында қалыптасады. Соған, сәйкес, осындай детекторларды сыртқы ығыстырушы кернеусіз, зарядты жинақтау тиімділігі жоғары, нейтрондарды тіркеуге байланысты пайда болатын қайтымды протондардың сенсоры және ядролық бөлшектердің санауышы ретінде қолдануға болады. Детекторлар спектрометриялық сапалығын температура 110°C дейін, ал жұмысшыкернеу (110–130)В дейін өскенше сақтай алады. Температура 130°C асқан кезде детектордың сипаттамаларының күрт төмендейтіні белгілі болды.

**Түйін сөздер:** нейтрон, альфа-бөлшек, галлий арсениді, детектор, сенсор, тіркеу, сипаттамалар, заряд, жинақтау тиімділігі, фотолитография.

#### Введение

Детекторы нейтронного излучения имеют широкий спектр применений и используются для радиозоологического мониторинга местности, контроля нейтронного фона, для создания комплексов контроля для таможенных служб, при обнаружении специальных ядерных материалов, в ядерной энергетике, в экспериментах ускорительной физики и физики космоса и в других направлениях. В зависимости от энергии нейтронов для их регистрации используются разные методы. Так, регистрация нейтронов с энергиями более 10 МэВ осуществляется с использованием их взаимодействий с ядрами углерода (в углеродсодержащих соединениях). Нейтроны с энергиями от 0.1 до 10 МэВ регистрируются через упругое рассеяние на легких атомах (главным образом на водороде), как правило, в водородсодержащих средах с последующей регистрацией протонов отдачи. Регистрация нейтронов с энергиями менее 0.1 МэВ производится или путем их замедления до энергий порядка 0.5 кэВ с последующей регистрацией продуктов реакции  $n + p \rightarrow d + \gamma$ , или путем их более сильного замедления до тепловых энергий [1].

В основном такие детекторы создаются на основе сцинтилляционных материалов [2, 3]. Использование сцинтилляторов позволяет работать приборам на их основе как в режиме счета нейтронов, так и одновременно-спектрометрии.

Среди многих перспективных решений есть полупроводниковые нейтронные детекторы, основными преимуществами которых является высокое быстродействие, низкая энергия ионизации, небольшие размеры, а также их компактность. В большинстве своем это кремниевые поверхностно-барьерные детекторы с радиаторами из водородсодержащих материалов, включающих изотопы  ${}^6\text{Li}$  или  ${}^{10}\text{B}$  [4]. Регистрация этими детекторами быстрых нейтронов (свыше 0.5 МэВ) осуществляется по протонам отдачи, тепловых нейтронов – по продуктам реакции на атомах элементов Li или B.

С начала двухтысячных годов проявился интерес к детекторам нейтронов на основе GaAs. Возобновление активных работ по созданию детекторов на основе GaAs стало возможным благодаря значительному улучшению качества материала [5–7]. Лидером в данной области исследований является коллаборация с головным институтом – Institute of Nuclear and Physical Engineering (Slovakia). Разработанные ими детекторы на объемном VGF (Vertical Gradient Freeze) или LEC (Liquid Encapsulated Czochralski) GaAs производства CMK Ltd. (Slovakia) оказались эффективными устройствами для обнаружения быстрых или тепловых нейтронов [8–11]. Высокая радиационная стойкость SiGaAs для высокоэнергетических фотонов [12] и нейтронов [13] предопределяет этот материал в качестве перспективного кандидата для изготовления детекторов нейтронов.

Однако детекторы на объемном SiGaAs требуют использования высоких рабочих смещений (до 300 В) для получения приемлемой эффективности сбора заряда, а также использования защиты от  $\gamma$ -фона [11]. Использование GaAs в качестве материала сенсора имеет свои преимущества, в том числе благодаря высокой радиационной стойкости и температурной устойчивости GaAs по сравнению с кремнием, а также значительному развитию технологий на нем (по сравнению с другими широкозонными материалами), используемыми при производстве приборов различных классов для СВЧ электроники, оптоэлектроники, логических схем и др. Настоящая работа посвящена исследованию температурной зависимости энергетического разрешения детектора на основе GaAs, который был создан в коллаборации Московского института стали и сплавов и Научно-исследовательского института экспериментальной и теоретической физики КазНУ им. аль-Фараби [14].

### Изготовление поверхностно-барьерного VPE GaAs сенсора площадью 25 мм<sup>2</sup>

Для изготовления поверхностно-барьерного VPE GaAs сенсора использовались эпитакси-

альные слои арсенида галлия толщиной 42 мкм с концентрацией носителей заряда на уровне  $3 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-3}$  [14, 15]. Плёнки выращивались на двухдюймовых  $n^{++}$ -GaAs подложках с ориентацией  $\langle 100 \rangle$ , легированных кремнием до концентрации  $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ . Для этого была использована известная хлоридная система Ga-AsCl<sub>3</sub>-H<sub>2</sub>, реализованная на установке с вертикальным реактором – ETR-100 (рис.1). Изготовление экспериментальных образцов GaAs сенсоров проводилось с помощью ранее разработанной технологии [16-18], включающей контактную фотолитографию с использованием 3 фотошаблонов, топология которых описана в [14].

На конечном этапе пластина разделялась на отдельные чипы размером  $6 \times 6 \text{ мм}^2$  посредством резки алмазным диском. Чипы приклеивались обратной стороной токопроводящим клеем ТОК-2 в металлокерамические корпуса КТ-94-2 производства ОАО «Завод «МАРС» (г. Торжок, Россия). Контакт к активной области выполнялся алюминиевой проволокой посредством термокомпрессионной сварки. Двухдюймовая пластина с готовыми чипами поверхностно-барьерных GaAs сенсоров и внешний вид сенсора в корпусе представлен на рисунке 2.

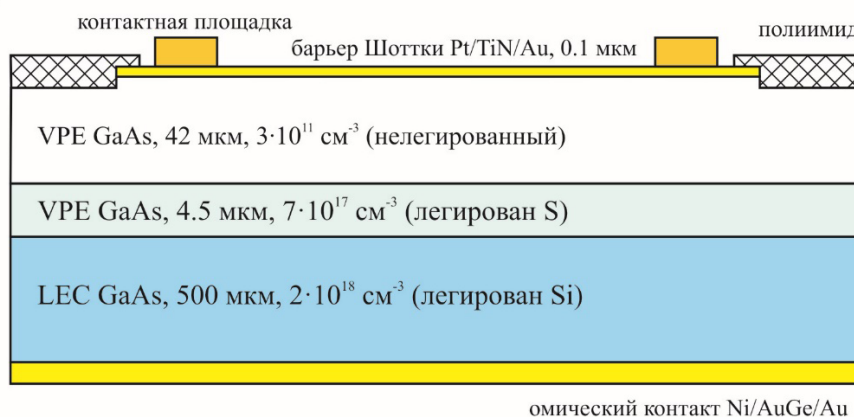


Рисунок 1 – Принципиальная конструкция поверхностно-барьерного GaAs сенсора

### Определение эксплуатационных характеристик VPEGaAs детектора

Измерения спектральных характеристик поверхностно барьерных структур проводились при комнатной температуре [15]. Детекторы располагались в специальной вакуумной камере при остаточном давлении  $10^{-2}$  мм.рт. столба. Облучение проводилось сколлимированным пуч-

ком  $\alpha$ -частиц от источника <sup>226</sup>Ra (источник <sup>226</sup>Ra испускает  $\alpha$ -частицы с энергиями 4.784, 5.489, 6.002 и 7.687 МэВ) с привлечением стандартной для альфа-спектрометрии схемы. Детектор через малощумящий зарядочувствительный предусилитель и усилитель-формирователь подключался к 512-канальному анализатору на базе ДЕ-Епо методике Института ядерной физики МЭ РК [19].

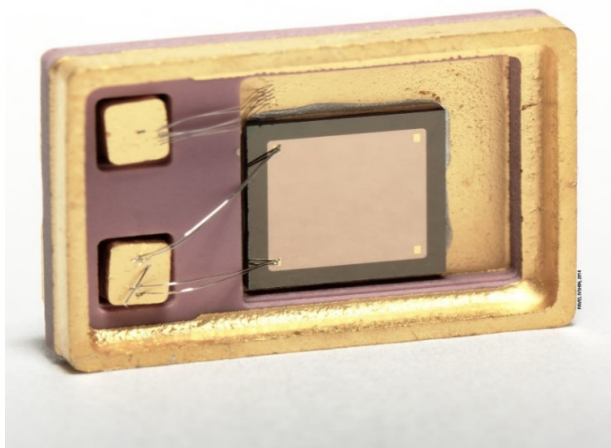


Рисунок 2 – Фотография поверхностно-барьерного VPE GaAs сенсора в корпусе

На первом этапе была исследована эффективность сбора заряда (CCE – **chargecollection efficiency**) в зависимости от поданного на детек-

торы напряжения смещения для определения рабочей величины. Для всех исследуемых детекторов результаты измерения зависимости показала, что эффективность сбора заряда от самых длиннопробежных частиц выходит на максимум при напряжении 60 В [15]. При этом полученные значения эффективности сбора заряда достаточно высоки. При нулевом смещении эффективность сбора заряда для энергий от 4.8 до 7.7 МэВ находится в пределах от 74 до 58 %. Это свидетельствует о том, что разработанные детекторы могут работать в режиме счета частиц (например, протонов отдачи) без внешнего смещения с высокой эффективностью сбора заряда и могут быть использованы в качестве сенсора протонов отдачи при регистрации быстрых нейтронов. На рисунке 3 приведен спектр альфа-частиц от источника  $^{226}\text{Ra}$ , измеренный при смещении 65 В на детекторе. Для оценки шумов спектрометрического тракта и их вклада в энергетическое разрешение детектора, одновременно проводилось измерение сигнала, подаваемого от генератора импульсов точной амплитуды.

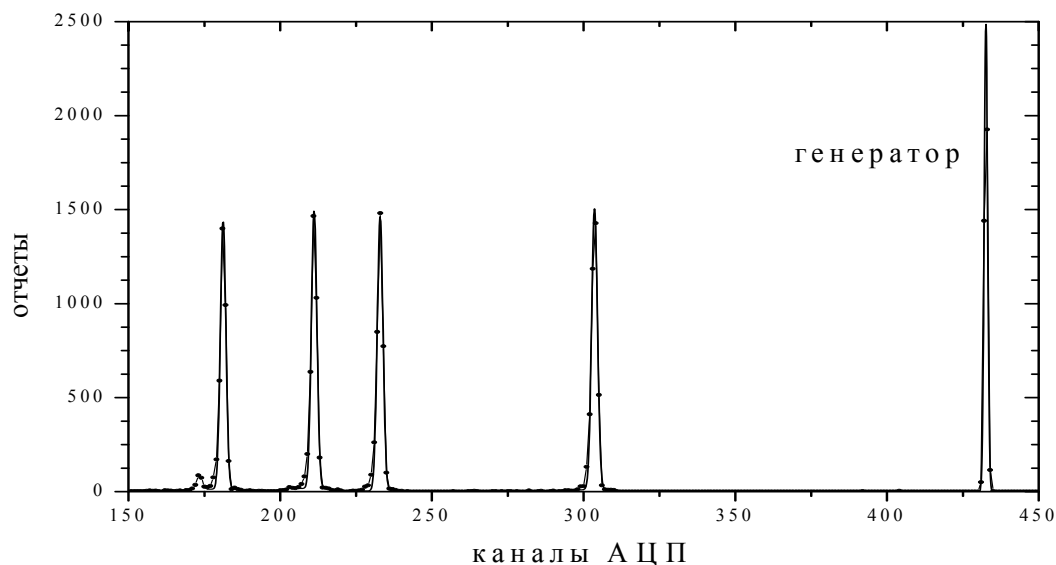


Рисунок 3 – Амплитудный спектр альфа-частиц от источника  $^{226}\text{Ra}$ , измеренный с помощью GaAs сенсоров. Крайний слева пик соответствует  $\alpha$ -частицам с энергией 4.784 МэВ; второй справа пик – 7.687 МэВ

Кроме того, детекторы демонстрируют энергетическое разрешение порядка 49 кэВ в исследуемом диапазоне энергий. На данном этапе не ставилось задачи определить максимальное энергетическое разрешение разработанных структур. Отметим, в настоящее время имеют-

ся уже наработки по созданию детекторов для альфа-частиц с высоким разрешением на основе соединений галлия [20]. Однако можно говорить о том, что полученный результат достаточно высок с учетом завышенного энергетического эквивалента шума (28.2 кэВ), который определяется в



основном шумами электронного тракта, а также существующих потерь энергии альфа-частиц в выходном окне источника  $^{226}\text{Ra}$ .

### Измерение температурных характеристик детекторов AsGa

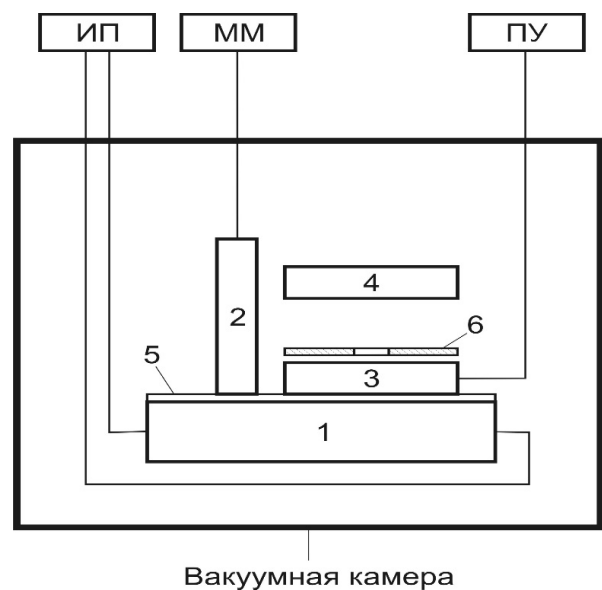
Для измерения температурных характеристик детекторов на основе GaAs необходимо было решить две задачи: создать экспериментальную установку для исследования влияния температуры на разрешение детекторов и измерить спектры альфа-частиц при различных температурных режимах. Созданная установка (рис.4) состоит из следующих компонентов:

- резистивного элемента  $I$ , соединенного с источником питания ИП и выполнявшего функцию нагревателя;
- тонкой изолирующей пленки 5, плотно прилежавшей к резистивному элементу  $I$ , служащей для устранения наводок надетектор3от резистора  $I$  и термопары2;
- детектора GaAs 3, плотно прилежавшего к изолирующей пленке 5 и соединенного с предусилителем ПУ.
- термопары 2, соединенной с мультиметром ММ для измерения температуры изолирующей пленки 5 и соответственно детектора GaAs 3;
- источника альфа-излучения 4;
- диафрагмы 6, установленной перед детектором

Измерения температурных характеристик детекторов проводились при высоком вакууме (давление около  $10^{-5}$  атм). Источник питания, мультиметр и предусилитель были вынесены за пределы вакуумной камеры и соединялись с резистором, термопарой и детектором посредством высоковакуумных разъемов. Для поддержания постоянной температуры детектора установка была оснащена системой автоматического включения и отключения тока.

Тестовое измерение, проведенное при комнатной температуре на данной установке, показало разрешение детектора  $\text{FWHM} = 52$  кэВ при энергетическом эквиваленте шума 27 кэВ. Следует отметить, что основными вкладками в энергетическое разрешение в данном случае были потери энергии  $\alpha$ -частиц в защитном покрытии источника и шумы электронного тракта. Влияние температуры на разрешение детекторов проверялось в диапазоне от 30 до  $150^\circ\text{C}$  при различных напряжениях смещения на детекторе. В интервале температур от 30 до  $70^\circ\text{C}$  при постоянном напряжении смещения (60 Вольт) разрешение де-

тектора не претерпевает каких-либо изменений. При дальнейшем увеличении температуры, как видно из рисунка 5, разрешение заметно ухудшается. На рисунке 6 представлены спектры при одной температуре  $100^\circ\text{C}$ , но различных напряжениях смещения (60, 80 и 90 Вольт). Видно, что увеличение напряжения существенно улучшает разрешение детектора. При температурах выше  $120^\circ\text{C}$  увеличение напряжения смещения уже не оказывает существенного влияния на улучшение разрешения детекторов GaAs.



1 – резистивный элемент, 2 – термопара, 3 – детектор, 4 – источник альфа-излучения, 5 – тонкая изолирующая пленка, 6 – диафрагма, ИП – источник питания, ММ – мультиметр, ПУ – предусилитель

**Рисунок 4** – Схема установки, предназначенной для измерения температурных характеристик детекторов GaAs

Не трудно заметить, что при рабочем смещении 60 В детектор выдерживает повышение температуры до  $80^\circ\text{C}$ . При дальнейшем росте до  $100^\circ\text{C}$  наблюдается дефицит амплитуды 214 кэВ для линии 7.687 МэВ и значительно ухудшается энергетическое разрешение – до 282 кэВ. Подобное поведение спектра следует связывать с уменьшением параметров переноса вследствие снижения подвижности носителей и времени жизни, обусловленного увеличением концентрации ионизированных рекомбинационных центров захвата (прежде всего EL2 центров). Увеличение рабочего смещения до 90 В позволяет нивелировать влияние температуры (рис. 6b), характеристики детектора полностью вос-

становливаются и соответствуют таковым при комнатной температуре. Таким образом, детектор сохраняет спектрометрические качества до температуры порядка 110°C, однако при этом необходимо увеличивать рабочее смещение до

110–130 В. Дальнейшее увеличение температуры до 130°C приводит к катастрофическому ухудшению характеристик детектора – детектор не «различает» отдельные линии источника при рабочих смещениях менее 150 В.

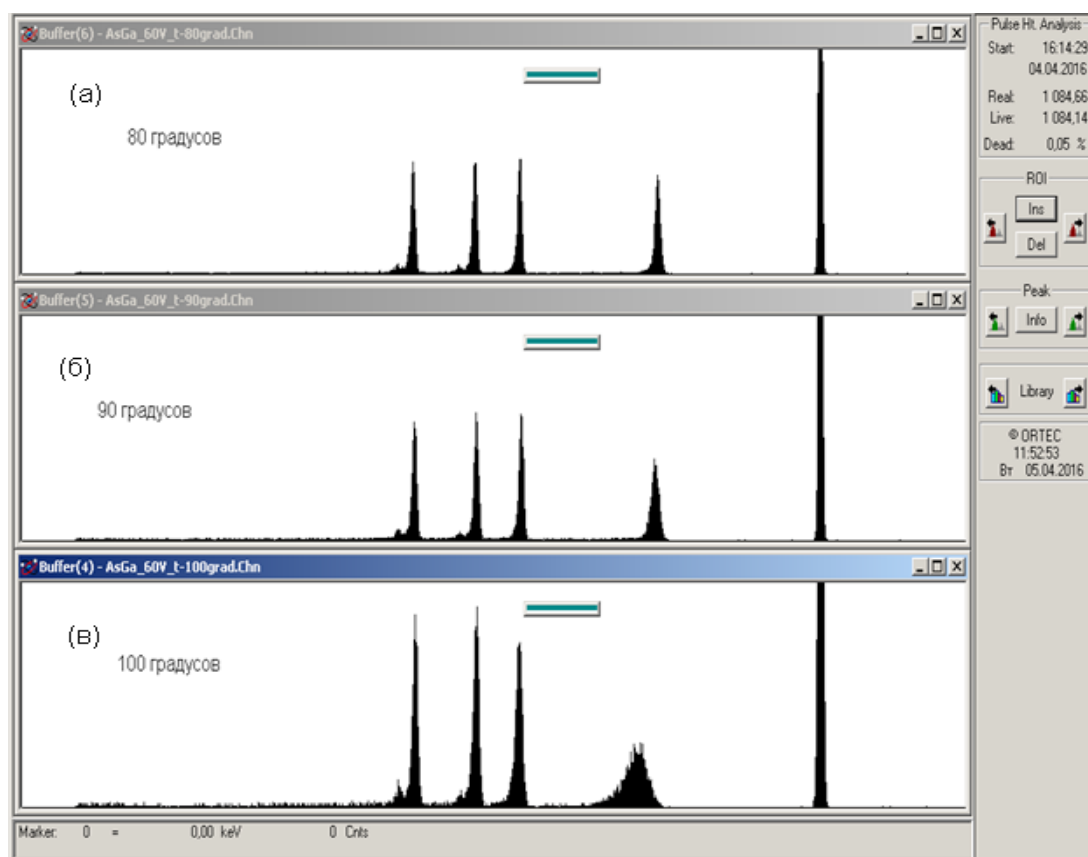


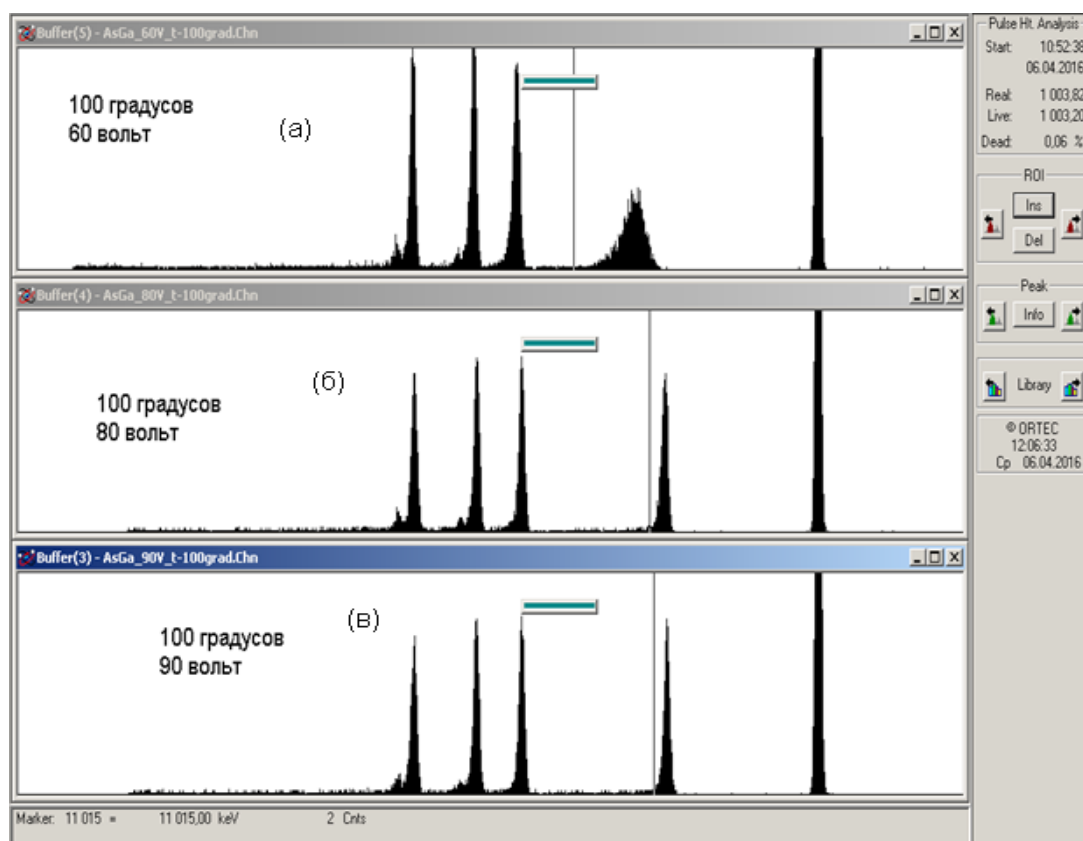
Рисунок 5 – Спектры альфа-частиц при напряжении смещения 60 Вольт и температурах 80°C (а), 90°C (б) и 100°C (в)

Можно утверждать, что температурный диапазон исследуемых детекторов ограничивается температурой 110–120°C и определяется наличием глубоких EL2 центров в материале. Полученный результат значительно превосходит характеристики кремниевых детекторов, которые теряют свои спектрометрические качества уже при температуре 50°C [21,22].

### Выводы

Выполнен комплекс испытаний детекторов на основе арсенида галлия–VPE GaAs. При испытаниях с привлечением источников альфа-ча-

стиц и гамма-квантов разработанные детекторы показали высокие характеристики, близкие к соответствующим показателям кремниевых детекторов. Это свидетельствует о высоком качестве эпитаксиальных слоев и разработанных детекторов. Тестовые оценки энергетического разрешения детекторов по параметру FWHM (full width at half maximum), оцененная на альфа-линии 5.499 МэВ от источника  $^{238}\text{Pu}$ , составила 52 кэВ при энергетическом шуме 22 кэВ. Полученные результаты позволяют рассчитывать на возможность использования изготовленных структур в качестве сенсора протонов отдачи при регистрации быстрых нейтронов.



**Рисунок 6** – Спектры альфа-частиц при температуре 100°C и напряжениях смещения 60В (а), 80В (б) и 90В (в)

### Литература

- 1 Бритвич Г.И. и др. Прототип детектора нейтронов на основе борсодержащего пластического сцинтиллятора – Препринт ИФВЭ 2004-9. – Протвино, 2004. – 22с.
- 2 Шульгин Б.В. и др. Новые детекторные материалы и устройства. – М.: Физматлит, 2009. – 360 с.
- 3 Beluchkin A.V. Modern trends in the development of position sensitive neutron detectors for condensed matter research // *Pramana – J. Phys.* – 2008. – Vol.71, №4. – P. 639.
- 4 Дегтярев Ю.Г. Modern trends in the development of position sensitive neutron detectors for condensed matter research // *Изв. РАН, сер. Физ.* – 2002. – Т.66, N.5. – С. 719-722.
- 5 Kordyasz A.J., Strzelecka S.G., Kownacki J. et al. Response of semi-insulating 100 mkm thick GaAs detector for  $\alpha$ -particles,  $\gamma$ -rays and X-rays // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* – 2005. – Vol. A 545. – P. 716.
- 6 Kang S.M., Ha J.H., Park Se-H. et al. Radiation Response of a Semi-insulating GaAs Semiconductor Detector for Charged Particle at Variable Operating Temperature // *Progress in nuclear science and technology.* – 2011. – Vol. 1. – P. 282.
- 7 Zatko B., Dubecky F., Bohacek P. et al. Development and evaluation of semiinsulating GaAs detectors in hot plasmas diagnostics // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* – 2011. – Vol. A 633. – P. S131.
- 8 Sagatova-Perdochova A., Dubecky F., Zatko B. et al. Detectors of fast neutrons based on semi-insulating GaAs with neutron converter layers // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* – 2007. – Vol. A 576. – P. 56.
- 9 Sagatova-Perdochova A., Ladziansky M. and Necas V., GaAs detectors with LiF layer for detection of thermal neutrons // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* – 2008. – Vol. A 591. – P. 98.
- 10 Zatko B., Sedlackova K., Dubecky F. et al. Detection of fast neutrons using detectors based on semi-insulating GaAs // *JINST.* – 2011. – 6 C12047.
- 11 Sagatova A., Zatko B., Sedlackova K. et al. Semi-insulating GaAs detectors optimized for fast neutron detection // *JINST.* – 2013. – 8 C03016.
- 12 Anh T., Perdochova Ly A., Necas V., Pavlicova V.. Radiation resistance study of semi-insulating GaAs-based radiation detectors to extremely high gamma doses // *Nuclear Physics B* – 2006. – Vol. 150. – P. 402.
- 13 Ladziansky M., Sagatova A., Necas V. et al. Deep traps study of radiation-damaged semi-insulating GaAs detectors introduced by neutrons // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research.* – 2009. – Vol. A 607. – P. 135.

- 14 Черных С.В. и др. Полупроводниковый детектор с внутренним усилением // Патент на полезную модель РФ №178710 от 17.04.2018
- 15 Диденко С.И., Черных С.В., Барышников Ф.М., Мукашев К.М. и др. Анализ характеристик полупроводникового детектора на основе арсенида галлия // Вестник КазНПУ им. Абая. –2015. –Т.3, №51. –С. 147-152.
- 16 Koltsov G.I., Didenko S.I., Chernykh A.V. et al. Contacts to High-Resistivity Epitaxial GaAs Layers for Detectors of Particles and X- or  $\gamma$ -Ray Photons // Semiconductors.– 2012.– Vol. 46, №8. – P. 1066.
- 17 Didenko S.I., Koltsov G.I., Chernykh A.V. et al. Schottky Barriers at Undoped Epitaxial GaAs Films Used For Nuclear Radiation Detectors // International Conference Nuclear Science and its Application 2012. Book of Abstracts.– 2012.– p. 171.
- 18 Baryshnikov F.M., Britvich G.I., Chernykh A.V. et al. Radiation Detectors Based on a Matrix of Ion-Implanted p-i-n Diodes on Undoped GaAs Epilayers // Ion Implantation Technology. (2012 AIP Conf. Proc.) – 2012.– 1496.– P. 50.
- 19 Артемов С.В., Бажажин А.Г., Буртебаев Н. и др. Двумерный анализатор на микроконтроллерах для идентификации и спектрометрии заряженных частиц // Приборы и техника эксперимента. – 2009. – №1. –с.168-170
- 20 Xu Q. et al. Bulk GaN alpha-particle detector with large depletion region and improved energy resolution // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment. – 2017. V. 849. – P. 11-15.22 21.
- 21 Bellinger S.L. et al. Improved high efficiency stacked microstructured neutron detectors backfilled with Nanoparticle  $^6\text{LiF}$  // IEEE Transactions on Nuclear Science. – 2012. –Vol. 59, №1. –P. 167-173.
- 22 Буртебаев Н., Мукашев К.М., Насурлла М., Черных С.В. Полупроводниковые детекторы ядерных излучений на основе арсенида галлия. – Алматы: Қазақ университеті. 2017, 150 с.

### References

- 1 G.I. Britvich and et al., Prototip detector neutronov na osnove borsoderzhashego plasticheskogo scintillyatora, Preprint IFVE 2004-9, (Protvino, 2004), 22 p. (in Rus.).
- 2 B.V. Shul'gin and et al., Novye detectornye materialy i ustroistva, (Moskva, Fizmatlit, 2009), 360 p. (in Rus.).
- 3 A.V. Beluchkin, Pramana, J. Phys., 71 (4), 639 (2008).
- 4 Y.G. Dygterev, Izv. RAN. Ser. Fiz., 66 (5), 719-722 (2002). (in Rus.).
- 5 A.J. Kordyasz, S.G. Strzelecka, J. Kownacki et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 545, 716 (2005).
- 6 S.M. Kang, J.H. Ha, Se-H. Park et al., Progress in nuclear science and technology, 1, 282 (2011).
- 7 B. Zatko, F. Dubecky, P. Bohacek et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 633, S131 (2011).
- 8 A. Sagatova-Perdochova, F. Dubecky, B. Zatko et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A 576, 56 (2007).
- 9 A. Sagatova-Perdochova, M. Ladziansky and V. Necas, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A 591, 98 (2008).
- 10 B. Zatko, K. Sedlackova, F. Dubecky et al., JINST, 6, C12047 (2011).
- 11 A. Sagatova, B. Zatko, K. Sedlackova et al., JINST, 8, C03016 ().
- 12 T. Ly Anh, A. Perdochova, V. Necas, and V. Pavlicova, Nuclear Physics B 150, 402 (2006).
- 13 M. Ladziansky, A. Sagatova, V. Necas et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A 607, 135 (2009).
- 14 S.V. Chernykh and et al. Poluprovonikovyi detector s vnutrennim usileniem, Patent na polrznuyu model RF №178710; 17.04.2018 (in Rus.).
- 15 S.I. Didenko, S.V. Chernykh, F.M. Baryshnikov, K.M. Mukashev and et al., Vestnic KazNPU im. Abaya, 3 (51), 147-152 (2005). (in Rus.).
- 16 G.I. Koltsov, S.I. Didenko, and A.V. Chernykh et al., Semiconductors, 46 (8), 1066 (2012).
- 17 S.I. Didenko, G.I. Koltsov, A.V. Chernykh et al., Book of Abstracts of Intern. Conf. Nuclear Science and its Application, 2012, p. 171.
- 18 F.M. Baryshnikov, G.I. Britvich, A.V. Chernykh et al, Ion Implantation Technology. (2012 AIP Conf. Proc.), 1496, 50 (2012).
- 19 S.V. Artemov, A.G. Bazhazhin, N. Burtebaev and et al., Pribory i tekhnika experimenta, 1, 168-170 (2009). (in Rus.).
- 20 Q. Xu et al., Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 849, 11-15.22 21 (2017).
- 21 S.L. Bellinger et al., IEEE Transactions on Nuclear Science, 59 (1), 167-173 (2012).
- 22 N. Burtebaev, K.M. Mukashev, M. Nasyrlla and S.V. Chernykh, Poluprovodnikovye detector yadernykh izluchenii na osnove arsenide Gallia. (Almaty: Qazaq universytety, 2017), 150 p. (in Rus.).

**Нусупов К.Х.<sup>1</sup>, Бейсенханов Н.Б.<sup>1\*</sup>, Бакранова Д.И.<sup>1</sup>,  
Кейінбай С.<sup>1</sup>, Сейтов Б.Ж.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Казахстанско-Британский технический университет, Казахстан, г. Алматы

<sup>2</sup>Международный казахско-турецкий университет им. Ходжи Ахмеда Ясави, Казахстан, г. Туркестан

\*e-mail: beisen@mail.ru

## **СТРУКТУРА ПЛЕНОК КАРБИДА КРЕМНИЯ, СИНТЕЗИРОВАННЫХ МЕТОДОМ МАГНЕТРОННОГО РАСПЫЛЕНИЯ**

Данная работа посвящена синтезу твердых пленок карбида кремния ( $\text{SiC}_x$ ) на поверхности монокристаллического кремния (c-Si) с тонкой прослойкой аморфного кремния (a-Si) методом магнетронного распыления и установлению новых закономерностей по влиянию термической обработки на состав, процессы кристаллизации и структуру слоев. Принципиальным отличием этого метода синтеза от традиционно используемого метода магнетронного распыления состоит в высокочастотном режиме 13,56 МГц магнетронного распыления мишени кремния и мишени графита. При режиме осаждения: rf – 150 Вт, 13,56 МГц; Ar – 2,4 л/час, 0,4 Па; 100°C, 10800 сек получена аморфная пленка  $\text{SiC}_x$  с высокой плотностью  $\sim 3,52 \text{ г/см}^3$ , содержащая нанокластеры с преобладанием укороченных SiC-связей, поглощающих при  $860 \text{ см}^{-1}$ . Быстрый отжиг (970°C, 5 мин, вакуум) приводит к частичному распаду кластеров, улучшению структуры пленки, формированию нанокристаллов  $\alpha\text{-SiC}$ ,  $\beta\text{-SiC}$  и Si и уменьшению плотности пленки. На основании данных рентгеновской дифракции и плотности пленки (3,522 и 3,397  $\text{г/см}^3$  до и после отжига) сделано предположение о присутствии включений алмаза и плотных кластеров.

**Ключевые слова:** кремний, полупроводники, карбид кремния, кристаллизация, магнетронное распыление.

Nussupov K.Kh.<sup>1</sup>, Beisenkhanov N.B.<sup>1\*</sup>, Bakranova D.I.<sup>1</sup>,  
Keyinbay S.<sup>1</sup>, Seitov B.Zh.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Kazakh-British Technical University, Kazakhstan, Almaty

<sup>2</sup>International Kazakh-Turkish Khodja Ahmed Yasawi University, Kazakhstan, Turkestan

\*e-mail: beisen@mail.ru

### **The structure of silicon carbide films synthesized by magnetron sputtering**

This paper is devoted to the synthesis of solid silicon carbide ( $\text{SiC}_x$ ) films on the surface of single-crystal silicon (c-Si) with a thin interlayer of amorphous silicon (a-Si) by magnetron sputtering and to establish new regularities in the influence of heat treatment on composition, crystallization processes and structure of layers. A principal difference between this method of synthesis and the traditionally used magnetron sputtering is the 13.56 MHz high-frequency magnetron sputtering of a silicon target and a graphite target. In the deposition mode: rf – 150 W, 13.56 MHz; Ar – 2.4 l/h, 0.4 Pa; 100°C, 10800 s, an amorphous  $\text{SiC}_x$  film with a high density of  $\sim 3.52 \text{ g/cm}^3$  containing nanoclusters with a predominance of shortened SiC bonds absorbing at  $860 \text{ cm}^{-1}$ , was obtained. Rapid annealing (970°C, 5 min, vacuum) leads to partial disintegration of clusters, an improvement in the structure of the film, the formation of  $\alpha\text{-SiC}$ ,  $\beta\text{-SiC}$  and Si nanocrystals and a decrease in the density of the film. Based on the data of X-ray diffraction and density of the film (3,522 and 3,397  $\text{g/cm}^3$  before and after annealing, respectively), it was suggested that there are inclusions of diamond and dense clusters.

**Key words:** Silicon, semiconductor, silicon carbide, crystallization, magnetron sputtering.

Нүсіпов К.Х.<sup>1</sup>, Бейсенханов Н.Б.<sup>1\*</sup>, Бакранова Д.И.<sup>1</sup>,  
Кейінбай С.<sup>1</sup>, Сейтов Б.Ж.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Қазақстан-Британ техникалық университеті, Қазақстан, Алматы қ.

<sup>2</sup>Қожа Ахмет Яссауи атындағы Халықаралық қазақ-түрік университеті, Қазақстан, Түркістан қ.

\*e-mail: beisen@mail.ru

### Магнетрондық ыдырату әдісімен синтезделген кремний карбиді қабыршақтарының құрылымы

Бұл мақала магнетрондық ыдырату әдісі арқылы аморфты кремнийдің (a-Si) жұқа қабаты бар монокристалдық кремний (c-Si) бетіндегі қатты кремний карбиді қабыршақтардың (SiC<sub>x</sub>) синтезіне, және қабат құрамына, құрылымына, кристаллизация процестеріне термиялық өңдеудің әсер етуі туралы жаңа заңдардың анықтауна арналған. Магнетрондық ыдырату әдетте қолданылатын тәсілінен осы синтездеу әдісінің негізгі айырмашылығы кремний және графит нысандарының магнетрондық 13,56 МГц жоғары жиілікті режимі болып табылады. Тұндыру режимінде: rf – 150 Вт, 13,56 МГц; Ar – 2,4 л/сағ, 0,4 Па; 100 °С, 10800 сек, 860 см<sup>-1</sup> сіңіретін қысқа SiC байланыстары басым болатын нанокластерлерді қамтитын ~ 3,52 г/см<sup>3</sup> жоғары тығыздығы бар аморфты SiC<sub>x</sub> пленкасы алынды. Тұндыру режимінде: rf – 150 Вт, 13,56 МГц; Ar – 2,4 л / сағ, 0,4 Па; 100 °С, 10 800 с, жоғары тығыздығы ~ 3,52 г / см<sup>3</sup> болатын аморфты SiC<sub>x</sub> қабыршағы алынды. Қабыршақта 860 см<sup>-1</sup> сіңіретін қысқартылған SiC байланыстары басым болатын нанокластерлер бар екенін көрсетілді. Жылдам күйдіру (970 °С, 5 мин, вакуум) кластерлердің жартылай ыдырауына, қабыршақ құрылымын жақсартуға, α-SiC, β-SiC және Si нанокристалдарының пайда болуына, қабыршақтың тығыздығын төмендетуге әкеп соғады. Рентгендік дифракция және пленка тығыздығының деректері бойынша (сәйкесінше 3,522 және 3,397 г / см<sup>3</sup>, күйдіргенге дейін және кейін), алмаз және тығыз кластерлердің қосындылары бар деп ұсынылды.

**Түйін сөздер:** кремний, жартылай өткізгіш, кремний карбиді, кристаллдану, магнетрондық ыдырату.

### Введение

Ценные для полупроводниковой электроники физико-химические свойства карбида кремния, такие как широкая запрещенная зона ( $E_g = 2,3-3,5$  эВ), высокие температура плавления (2830 °С), химическая стойкость, теплопроводность, подвижность носителей заряда и твердость (33400 Мн/м<sup>2</sup>) обусловили его широкое применение в **радиационно-стойкой электронике, высокотемпературной электронике, высокочастотной электронике, оптоэлектронике** [1], а также в качестве жаростойких материалов при изготовлении нарезных дисков и буров, в конструкции термоядерных реакторов [2], в покрытиях корпуса космических кораблей [3]. Электронные приборы на основе SiC обладают высоким быстродействием и возможностью работы при температурах до 600 °С [4].

В связи с трудностями синтеза кристаллического карбида кремния малогабаритные и дорогостоящие SiC-пластины сильно ограничивают их применение в крупномасштабном промышленном производстве [5]. Кроме того, различие в параметрах решеток карбида кремния и монокристаллического кремния составляет ~20%, а разница в их термических коэффициентах расширения ~8% [6]. Поэтому, выращивание эпи-

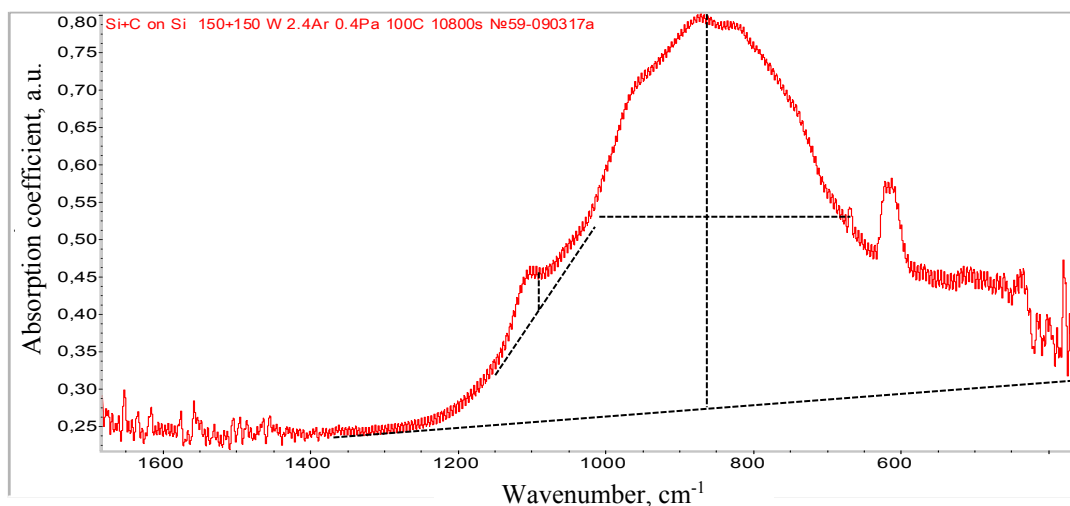
таксиальных слоев SiC на подложке Si является нетривиальной задачей [6, 7]. Например, методом ионной имплантации [1, 4, 5, 8, 9], ионно-лучевого распыления [10, 11], либо плазмо-стимулированного химического осаждения из газовой фазы [12] удается получить аморфные пленки SiC с последующей их кристаллизацией в процессе отжига (900-1300 °С). Были достигнуты успехи по синтезу тонких эпитаксиальных пленок SiC на Si методом замещения атомов [6, 7, 13-15]. Метод магнетронного распыления получил распространение благодаря относительно большим скоростям роста, хорошей адгезии пленок SiC и достаточно низкой стоимости технологического процесса [16-19]. В [16] предложено магнетронное распыление двухкомпонентной мишени, которая составлена из отдельных частей C и Si. В целом, при температурах ниже 500 °С структура пленок SiC является аморфной. При магнетронном распылении на постоянном токе обычно используются поликристаллические сплавленные мишени из кремния и углерода [17]. Альтернативой использования сплавленной мишени является распыление мишени из чистого кремния в смеси аргона и метана [18]. Полученные пленки SiC имели поликристаллическую структуру с нанометровыми столбчатыми зернами. В [19] предложен метод осаждения аморфного a-Si<sub>1-x</sub>C<sub>x</sub>

с помощью радиочастотного магнетронного со-  
распыления двух или нескольких мишеней.

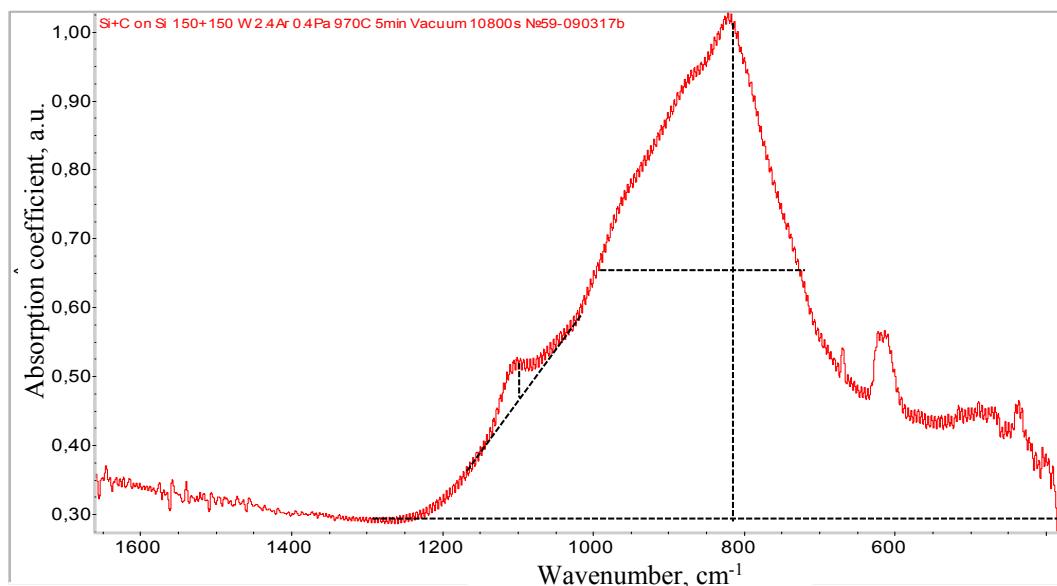
В данной работе методом магнетронного  
распыления осуществлен синтез толстых пленок  
карбида кремния на поверхности тонкого  
слоя аморфного кремния, выращенного на по-  
верхности монокристаллической подложки  
кремния.

### Эксперимент

Осаждение пленок SiC осуществлено на уста-  
новке МАГНА ТМ-200-01 при одновременном  
распылении мишени кремния и мишени графита  
в высокочастотном режиме 13,56 МГц при мощ-  
ности 150 Вт, расходе газа Ar 2,4 л/час, давлении в  
камере 0,4 Па, температуре подложки 100°



**Рисунок 1** – Спектр ИК-поглощения пленки SiC<sub>x</sub>, осажденной  
на поверхности пластины c-Si магнетронным распылением (150 Вт, 10800 с, Ar– 2,4 л/ч, 0,4 Па)

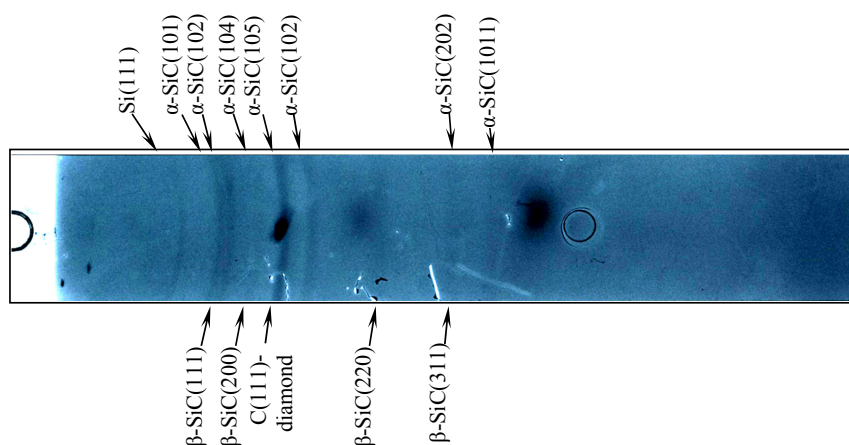


**Рисунок 2** – Спектр ИК-поглощения пленки SiC, осажденной  
на поверхности пластины Si магнетронным распылением (150 Вт, 10800 с, Ar– 2,4 л/ч, 0,4 Па)  
после отжига при 970°С в течение 5 мин (вакуум)

На рентгеновской дебаеграмме после быстрого отжига ( $970^{\circ}\text{C}$ , 5 мин, вакуум) обнаружено 9 линий (рис. 3). Только одна линия соответствует фазе нано-Si – наиболее интенсивной линии Si(111). 3 линии из остальных 8 линий соответствуют гексагональной фазе  $\alpha$ -SiC и одна линия  $\beta$ -SiC. 3 линии из оставшихся 4 линий по расположению могут соответствовать как линиям  $\beta$ -SiC, так и  $\alpha$ -SiC, поскольку расположение этих линий на дебаеграмме по значениям углов  $2\theta$  очень близко друг к другу. Известно, что нагревание  $\beta$ -SiC до температур выше  $1700^{\circ}\text{C}$  [22] либо  $2000^{\circ}\text{C}$  [23,24] способно приводить к постепенному переходу кубической фазы ( $\beta$ -SiC) в гексагональную (2H, 4H, 6H, 8H)  $\alpha$ -SiC и ромбическую

(15R) фазу [22]. Низкотемпературное формирование  $\alpha$ -SiC может быть обусловлено влиянием высокочастотного режима 13,56 МГц магнетронного распыления, использованного при одновременном распылении мишеней кремния и графита.

Кроме того, линия  $\alpha$ -SiC(105) в области  $2\theta = 44-45^{\circ}$  обладает максимальной интенсивностью на дебаеграмме, хотя согласно базе данных дифрактометра «ДРОН-6» линия должна иметь низкую интенсивность 28% – в два раза слабее линии  $\alpha$ -SiC(102). Известно, что максимальной интенсивностью (100%) в области  $2\theta = 44,14^{\circ}$  обладает линия C(111) алмаза. Предположено, что пленки SiC могут содержать нановключения алмаза.



**Рисунок 3** – Дебаеграмма пленки SiC, осажденной на поверхности Si магнетронным распылением (150 Вт, 10800 с, Ar – 2,4 л/ч, 0,4 Па) после отжига ( $970^{\circ}\text{C}$ , 5 мин, вакуум)

В связи с этим, были проведены измерения плотности этой пленки до отжига методом рентгеновской рефлектометрии с использованием двух спектральных линий  $\text{CuK}_\alpha$  и  $\text{CuK}_\beta$ . (рис.4). По величине критического угла полного внешнего отражения  $\theta_c = 0,27366^{\circ}$  (таблица 1, рис. 4б) с помощью программы Henke [25] определена плотность пленки  $\text{SiC}_x$ , которая составила  $3,522 \text{ г/см}^3$ , превосходит плотность карбида кремния  $3,21 \text{ г/см}^3$  и почти равна плотности алмаза  $3,51 \text{ г/см}^3$ .

Не наблюдается осцилляций интенсивности (рис. 4а) вследствие большой длительности напыления (10800 сек). Рентгеновский рефлектометр обычно определяет толщины пленок в пределах 2-400 нм. При больших толщинах осцилляции становятся мелкими и практически сливаются друг с другом.

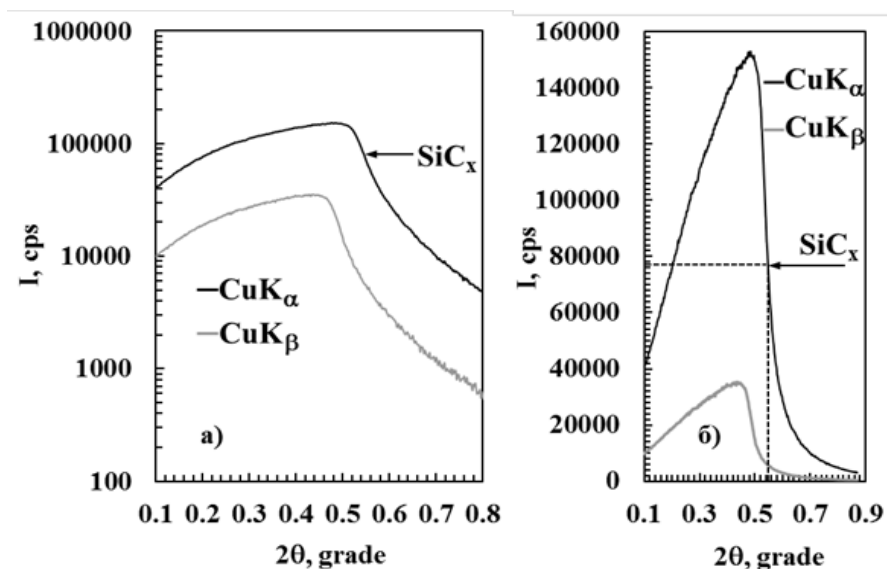
Высокая плотность аморфной пленки  $\text{SiC}_x$  сразу после осаждения при комнатной температуре является необычным фактом и требует дальнейших исследований. На других образцах плотность пленок, синтезированных аналогичным образом, составила величины в пределах  $3,204 - 3,593 \text{ г/см}^3$  сразу после осаждения в зависимости от расположения образца в камере. Предварительные трактовка результатов предполагает в качестве первопричины влияние высокочастотной плазмы на структуру осаждаемой пленки, которое приводит к формированию плотных углеродных и углеродно-кремниевых кластеров, содержащих кратные межатомные связи.

После быстрого отжига ( $970^{\circ}\text{C}$ , 5 мин, вакуум) плотность пленки, дебаеграмма которой показана на рис. 3, уменьшается в 1,04 раза до

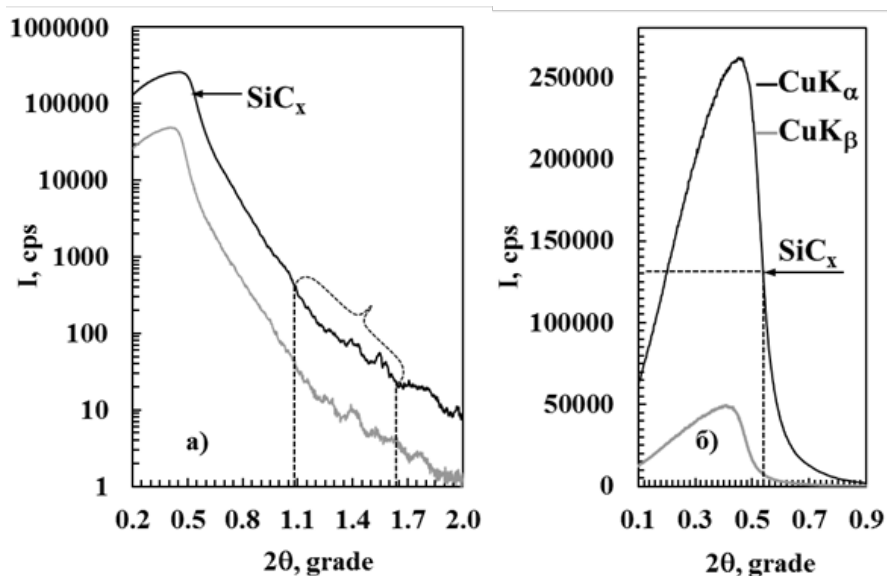


3,397 г/см<sup>3</sup> (рис. 5, таблица 2). Отжиг приводит к улучшению качества структуры поверхности пленки с увеличением интенсивности главного максимума рентгеновских отражений от 152997 импульсов в секунду (рис. 4б, таблица 1) до 262149 импульсов в секунду (рис. 5б, таблица 2). Предполагается, что происходит частичный распад плотных кластеров и форми-

рование нанокристаллов SiC. Как было показано в [9], интенсивные процессы твердофазной кристаллизации в пленках карбида кремния начинаются при температуре 900°C, а интенсивное формирование гранулярной структуры поверхности с появлением зерен и увеличением шероховатости происходит при температурах 1100°C и выше.



**Рисунок 4** – Рентгеновская рефлектометрия пленки SiC<sub>x</sub>, осажденной на поверхности пластины Si магнетронным распылением (150 Вт – rf, 10800 сек, Ar–2,4 л/час, 0,4 Па), в логарифмическом (а) и натуральном (б) масштабах



**Рисунок 5** – Рентгеновская рефлектометрия пленки SiC<sub>x</sub>, осажденной на s-Si магнетронным распылением (150 Вт – rf, 10800 сек, Ar–2,4 л/час, 0,4 Па) после отжига (970°C, 5 мин, вакуум), в логарифмическом (а) и натуральном (б) масштабах

**Таблица 1** – Определение плотности  $\rho$  покрытия по программе Henke

Пленка	$I_{\max}, \text{с}^{-1}$	$I_{\max}/2, \text{с}^{-1}$	$2\theta_{\text{с}}, \text{градус}$	$\theta_{\text{с}}, \text{градус}$	$\theta_{\text{с}}, \text{мрад}$	$\rho, \text{г/см}^3$
$\text{SiC}_x$	152997	76499	0,54731	0,27366	4,776	3,522

**Таблица 2** – Определение плотности  $\rho$  покрытия по программе Henke

Пленка	$I_{\max}, \text{с}^{-1}$	$I_{\max}/2, \text{с}^{-1}$	$2\theta_{\text{с}}, \text{градус}$	$\theta_{\text{с}}, \text{градус}$	$\theta_{\text{с}}, \text{мрад}$	$\rho, \text{г/см}^3$
$\text{SiC}_x$	262149	131075	0,53746	0,26873	4,690	3,397

**Таблица 3** – Определение толщины  $d$  слоя по формуле  $2d \cdot \sin\theta = \lambda$ , или  $d = \lambda/2\theta$

Пленка	$(2\theta)_p, \text{градус}$	$(2\theta)_r, \text{градус}$	$j - i$	$2\theta_{\text{ав}} = [(2\theta)_j - (2\theta)_i] / (j - i), \text{градус}$	$\lambda, \text{нм}$	$d, \text{нм}$
$\text{SiC}_x$	1.648	1.082	14	0.0404	0.15420	218.5
$\text{SiC}_x$	1.480	0.970	14	0.0364	0.13923	219.0

На рис. 5 видны крупные осцилляции интенсивности, состоящие из мелких пиков, т.е. пленка является многослойной. Тонкий слой дает крупные осцилляции, а толстый слой дает мелкие осцилляции, соответствующие толщине

219 нм (таблица 3). Этот слой плотностью 3,397 г/см<sup>3</sup> предположительно отличается по плотности от нижележащего слоя, и поэтому появились осцилляции.

#### Литература

- 1 Lindner J.K.N. High-dose carbon implantations into silicon: fundamental studies for new technological tricks // *Appl.Phys. A.* – 2003. – Vol. 77. – P. 27 – 38.
- 2 Zinkle S.J., Was G.S. Materials challenges in nuclear energy // *Acta Materialia.* – 2013. – Vol.61. – P.735–758. doi: 10.1016/j.actamat.2012.11.004.
- 3 United State Patent. Heat resistant material and hot structure member both space shuttle, space shuttle, and method for producing heat resistant material for space shuttle / Oguri K., Sekigawa T. // *Pub. № US 2004/0180242 A1.*
- 4 Chen D., Wong S.P., Yang Sh., Mo D. Composition, structure and optical properties of SiC buried layer formed by high dose carbon implantation into Si using metal vapor vacuum arc ion source // *Thin Solid Films.* – 2003. – 426. – P. 1–7.
- 5 Liangdeng Y., Intarasiri S., Kamwanna T., Singkarat S. In book: Ion beam applications in surface and bulk modification of insulators. – Austria, Vienna: IAEA-TECDOC-1607. 2008. – P. 63.
- 6 Kukushkin S.A. and Osipov A.V. Topical review. Theory and practice of SiC growth on Si and its applications to wide-gap semiconductor films // *J. Phys. D Appl. Phys.* – 2014. – Vol.47. – P. 313001–313041.
- 7 Kukushkin S. A. and Osipov A.V., New method for growing silicon carbide on silicon by solid-phase epitaxy: model and experiment // *Phys. Solid State.* – 2008. – Vol.50 (7). – P.1238–1245.
- 8 Nussupov K.Kh., Beisenkhanov N.B., Valitova I.V., Mit' K.A., Mukhamedshina D.M., Dmitrieva E.A. Structure properties of carbon implanted silicon layers // *J. of Materials Science: Materials in Electronics.* – 2008. – Vol.19. – P. 254–262.
- 9 Nussupov K.Kh., Beisenkhanov N.B., Zharikov S.K., Beisembetov I.K., Kenzhaliev B.K., Akhmetov T.K., Seitov B.Zh. Structure and Composition of Silicon Carbide Films Synthesized by Ion Implantation // *Phys. Solid State.* – 2014. – Vol.56 (11).– P. 2307–2321.
- 10 Beisembetov I.K., Nusupov K.Kh., Beisenkhanov N.B., Zharikov S.K., Kenzhaliev B.K., Akhmetov T.K., and Seitov B.Zh.. Synthesis of SiC Thin Films on Si Substrates by Ion-Beam Sputtering // *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques.* – 2015. – Vol.9, No.2. – P. 392-399.
- 11 Volz K., Kiuchi M., Okumura M., Ensinger W. C–SiC–Si gradient films formed on silicon by ion beam assisted deposition at room temperature // *Surface and Coatings Technology.* – 2000. – Vol.128–129. – P. 274-279.
- 12 Sun Y., Miyasato T., Wigmore J.K., Sonoda N., Watari Y. Characterization of 3C-SiC films grown on monocrystalline Si by reactive hydrogen plasma sputtering // *Journal of Applied Physics.* – 1997. – Vol.82 (5). – P. 2334-2341.

- 13 Kukushkin S.A., Osipov A.V., Feoktistov N.A. Synthesis of epitaxial silicon carbide films through the substitution of atoms in the silicon crystal lattice: a review // *Phys. Solid State*. – 2014. – Vol.56 (8). – P. 1507–1535.
- 14 Kukushkin S.A., Nusupov K.Kh., A.V. Osipov, N.B. Beisenkhanov and D.I. Bakranova. X-Ray Reflectometry and Simulation of the Parameters of SiC Epitaxial Films on Si(111), Grown by the Atomic Substitution Method // *Physics of the Solid State*. – 2017. – Vol. 59 (5). – P. 1014–1026.
- 15 Kukushkin S.A., Nussupov K.Kh., Osipov A.V., Beisenkhanov N.B., Bakranova D.I. Structural properties and parameters of epitaxial silicon carbide films, grown by atomic substitution on the high-resistance (111) oriented silicon // *Superlattices and Microstructures*. – 2017. – Vol.111. – P.899-911. <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0749603617310200>
- 16 Перекрестов В.И., Корнющенко А.С., Загайко И.В. Получение пленок карбида кремния методом магнетронного распыления составной углерод-кремниевой мишени // *Журнал нано- и электронной физики*. – 2015. – Vol.7 (2). – P. 02016.
- 17 Rajab S.M., Oliveira I.C., Massi M., Maciel H.S., dos Santos Filho S.G., Mansano R.D. Effect of the thermal annealing on the electrical and physical properties of SiC thin films produced by RF magnetron sputtering. // *Thin Solid Films*. – 2006. – Vol.515. – P.170-175.
- 18 Lei Y.M., Y.H. Yu, C.X. Ren, S.C. Zou, D.H. Chen, S.P. Wong, I.H. Wilson. Compositional and structural studies of DC magnetron sputtered SiC films on Si(111) // *Thin Solid Films*. – 2000. – Vol.365.– P. 53-57.
- 19 Joung Y.-H., Kang H.I., Kim J.H., Lee H.-S., Lee J., Choi W.S. SiC formation for a solar cell passivation layer using an RF magnetron co-sputtering system // *Nanoscale Res. Lett.* – 2012. – Vol.7(1). – P.22.
- 20 Touryanski A.G., Vinogradov A.V., Pirshin I.V., X-ray reflectometer. US Patent No. 6041098 -2000.
- 21 Mutschke H., Andersen A.C., Clément D., Henning T. Peiter. Infrared properties of SiC particles // *Astron.Astrophys.* – 1999. – Vol.345. – P.187–202.
- 22 Карбид кремния. Под ред. Г.Хенита и Р.Рол, пер. с англ. – М. Мир, 1972. – 349 с.
- 23 Parish C.M., Koyanagi T., Kondo S., Katoh Y. Irradiation-induced  $\beta$  to  $\alpha$  SiC transformation at low temperature // *Sci Rep.* – 2017. – Vol.7. – P.1198.
- 24 Meher S., Rooyen I.J., Lillo T.M. A Novel Dual-Step Nucleation Pathway in Crystalline Solids under Neutron Irradiation // *Sci Rep.* – 2018. – Vol. 8. – P.98.
- 25 Henke B.L., Gullikson E.M., Davis J.C. Atomic Data and Nuclear Data Tables. – 1993.– Vol.54 (2). – P.181. [http://henke.lbl.gov/optical\\_constants/](http://henke.lbl.gov/optical_constants/).

#### References

- 1 J.K.N. Lindner, *Appl.Phys. A* 77, 27-38 (2003).
- 2 S.J. Zinkle and G.S. Was, *Acta Materialia*. 61, 735-758 (2013).
- 3 K. Oguri and T. Sekigawa, US Patent № US 2004/0180242 A1.
- 4 D. Chen, S.P. Wong, Sh. Yang, and D.Mo, *Thin Solid Films* 426, 1-7 (2003).
- 5 Y. Liangdeng, S. Intarasiri, T. Kamwanna, and S. Singkarat, Ion beam applications in surface and bulk modification of insulators, (Austria, Vienna, 2008), 63 p.
- 6 S.A. Kukushkin and A.V. Osipov, *J. Phys. D Appl. Phys.* 47, 313001-313041. (2014).
- 7 S.A. Kukushkin and A.V. Osipov, *Phys. Solid State*. 50 (7), 1238-1245 (2008).
- 8 K.Kh. Nussupov, N.B. Beisenkhanov, I.V. Valitova, K.A. Mit', D.M. Mukhamedshina, and E.A. Dmitrieva, *J. of Materials Science: Materials in Electronics*, 19, 254-262 (2008).
- 9 K.Kh. Nussupov, N.B. Beisenkhanov, S.K. Zharikov, I.K. Beisembetov, B.K. Kenzhaliev, T.K. Akhmetov, and B.Zh. Seitov, *Phys. Solid State* 56 (11), 2307-2321 (2014).
- 10 I.K. Beisembetov, K.Kh. Nusupov, N.B. Beisenkhanov, S.K. Zharikov, B.K. Kenzhaliev, T.K. Akhmetov, and B.Zh. Seitov, *Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 9 (2), 392-399 (2015).
- 11 K. Volz, M. Kiuchi, M. Okumura, and W. Ensinger, *Surface and Coatings Technology*, 128–129, 274-279 (2000).
- 12 Y. Sun, T. Miyasato, J.K. Wigmore, N. Sonoda, and Y. Watari, *Journal of Applied Physics*, 82 (5), 2334-2341 (1997).
- 13 S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, N.A. Feoktistov, *Phys. Solid State*, 56(8), 1507-1535 (2014).
- 14 S.A. Kukushkin, K.Kh. Nusupov, A.V. Osipov, N.B. Beisenkhanov and D.I. Bakranova, *Phys.Solid State*, 59(5), 1014–1026 (2017).
- 15 S.A. Kukushkin, K.Kh. Nussupov, A.V. Osipov, N.B. Beisenkhanov and D.I. Bakranova, *Superlattices and Microstructures*, 111, 899-911 (2017).
- 16 V.I. Perekrestov, A.S. Kornushchenko, I.V. Zahaiko, *J. Nano- Electron. Phys.*, 7 (2), 02016 (2015). (in Russ.).
- 17 S.M. Rajab, I.C. Oliveira, M. Massi, H.S. Maciel, S.G. dos Santos Filho, and R.D. Mansano, *Thin Solid Films*, 515, 170-175 (2006).
- 18 Y.M. Lei, Y.H. Yu, C.X. Ren, S.C. Zou, D.H. Chen, S.P. Wong, and I.H. Wilson, *Thin Solid Films*, 365, 53-57 (2000).
- 19 Y.-H. Joung, H.I. Kang, J.H. Kim, H.-S. Lee, J. Lee, and W.S. Choi, *Nanoscale Res. Lett.*, 7(1), 22 (2012).
- 20 A.G. Touryanski, A.V. Vinogradov, and I.V. Pirshin, US Patent No. 6041098 (2000).
- 21 H. Mutschke, A.C. Andersen, D. Clément, and T. Peiter Henning, *Astron.Astrophys*, 345, 187-202 (1999).
- 22 G. Henita and R.Rol, *Silicon carbide* (Moscow: Mir, 1972), 349 p. (in Russ.).
- 23 C.M. Parish, T. Koyanagi, S. Kondo, and Y. Katoh, *Sci Rep.*, 7, 1198 (2017).
- 24 S. Meher, I.J. Rooyen, and T.M. Lillo, *Sci Rep.* 8, 98 (2018).
- 25 B.L. Henke, E.M. Gullikson, and J.C. Davis, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 54 (2), 181 (1993).

**Михайлов Л.В., Ерсайн Р.Ж., Михайлова С.Л.\*,  
Исмаилова Г.А., Соколов А.С.**

Казахский национальный университет им. аль-Фараби,  
Казахстан, г. Алматы, \*email: svetik.mikhailova@gmail.com

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА УЛАВЛИВАНИЯ ПЫЛИ ОКОННЫМ ОЧИСТИТЕЛЕМ ВОЗДУХА**

Можно использовать фасады жилых и административных городских строений для очистки воздушного бассейна города от пыли и гари, включив их в бытовые системы и устройства smart фасадов зданий. В этом случае достигается не только экологическая цель по борьбе со смогом, но и за счёт использования солнечных панелей и энергосбережения в системах, повышающих комфортность помещения, решаются экономические проблемы рентабельного использования альтернативных источников энергии и снижения выбросов парниковых газов. Поскольку пользователем устройств пылеулавливания предполагается сделать физических лиц, одной из задач становится необходимость разработать безопасный и экономичный способ очистки воздушных масс. Для этого нужно воспользоваться потоками возобновляемой энергии, поступающими на фасады зданий и оконные проёмы: восходящие и нисходящие воздушные потоки, солнечное излучение, тепловые потоки. Одна из важнейших задач сформировать потребительский спрос, на устройства использующие разрабатываемый способ очистки воздуха от пыли и гари. Для этого необходимо найти сопутствующие потребительские функции, которые были бы совмещены в одном устройстве с очистителем воздуха. В работе показано, что напряжения  $U_э = 600$  В на аккумуляторе и затрат энергии в 50 Дж будет вполне достаточно, чтоб зарядить частицы пыли и не допустить их сдувания воздухом.

**Ключевые слова:** пыль, смог, очистка, улавливание, фотоэлектричество, свет, тепло, smart окно.

Mikhailov L.V., Yersayn R.Zh., Mikhailova S.L.\*,  
Ismailova G. A., Sokolov A. S.

Al-Farabi Kazakh National University,  
Kazakhstan, Almaty, \*email: svetik.mikhailova@gmail.com

### **Modeling of the collating dust process by a window air cleaner**

You can use the facades of residential and administrative urban buildings to clean the city's air from ash and dust, including them in household systems and devices of smart building facades. In this case, not only the ecological task of smog control will be achieved, but economic problems with efficient use of alternative energy sources and reducing greenhouse gas emission using solar panels and energy saving technology in systems that improve comfort of the rooms as well. Since users of dust-collected devices are supposed to be natural persons, one of the tasks is requirement to develop a safe and economy-type of air cleaning. So, it is necessary to use of renewable energy flows coming to the building facades and windows which are upstream and downstream air, solar irradiation and heat flows. One of the most important tasks is to generate consumer demand for devices using the developed method of air cleaning from ash and dust. To do this, it is essential to find accompanied consumer functions that will be united in one device with an air purifier. It is shown that voltage  $U_э = 600$  V and the battery energy costs 50J will be sufficient to charge the dust particles and prevent them from deflating air.

**Key words:** dust, smog, cleaning, capture, photo electricity, light, heat, smart facade, window.

Михайлов Л.В., Ерсайн Р. Ж., Михайлова С.Л. \*,  
Исмаилова Г.А., Соколов А.С.

Әл-Фараби ат. Қазақ ұлттық университеті,  
Қазақстан, Алматы қ., \*e-mail: svetik.mikhailova@gmail.com

### Шаңсорғышты ауа тазартқыштан тазарту процесін модельдеу

Тұрғын және әкімшілік қала ғимараттарының қасбеттерін қаланың әуе бассейнін шаңнан және түтіннен тазалау үшін тұрмыстық жүйелерге және смарт ғимарат қасбеттеріне енгізіп пайдалану. Бұл ретте түтінмен күресуде экологиялық мақсат қана орындалып қоймай, сонымен қатар үй-жайлардың жайлылығын жақсартатын энергия үнемдеуші жүйелер мен күн панельдерін пайдалану арқылы баламалы энергия көздерін оңтайлы қолданып және парниктік газдар шығындарын азайтып экономикалық мәселелер шешімін табады. Шаңды жинау құралдарын пайдаланушылар ретінде жеке тұлғалар болатындықтан, міндеттердің тағы бірі болып ауа массасын тазалаудың қауіпсіз және үнемді әдісін әзірлеу қажеттілігі болып табылады. Ол үшін ғимараттардың қасбеттеріне және терезелердің ойықтарына келетін: көтерілетін және түсетін ауа ағындары, күн сәулесі, жылу ағыны секілді жаңартылатын энергия ағындарын пайдалану қажет. Ең маңызды міндеттердің бірі ауаның шаң мен күйеден тазарту әдісін қолданатын аспаптарға деген тұтынушылық сұранысты қалыптастыру. Мұны істеу үшін ауаны тазартқышпен бірге бір құрылғыға біріктіретін тиісті тұтынушы функцияларын табу қажет. Зертте көрсетілгендей, батареяда  $U_e = 600$  В кернеуі мен 50 Дж энергияның құны шаңның бөлшектерін зарядтауға және ауа ағады.

**Түйін сөздер:** шаң, түтін, тазалау, ұстап қалу, фотоэлектрлік, жарық, жылу, смарт қасбет, терезе.

### Введение

Экологические проблемы привели к стремительному развитию «зеленых» технологий, но несмотря на несколько десятилетий развития альтернативных источников энергии АИЭ [1,2], их рентабельность всё ещё в разы меньше рентабельности энергетических установок на ископаемом топливе. Трудно представить, что при достаточно низкой цене на энергию от традиционных источников независимый городской потребитель востребует дорогую энергию от альтернативных. С другой стороны, только при городской плотности потребителей возможно добиться хоть какого-то небольшого, но устойчивого спроса на устройства альтернативной энергетики. Поэтому самым привлекательным способом распределения АИЭ, в частности, солнечных панелей, среди независимых городских потребителей, является способ встраивания их в бытовые устройства, имеющие спрос на рынке из-за удовлетворения других нужд потребителя. Среди этих нужд может быть забота о здоровье, о комфортности жилья, о надёжности и безопасности функционирования бытовых устройств, об эстетике и тому подобные.

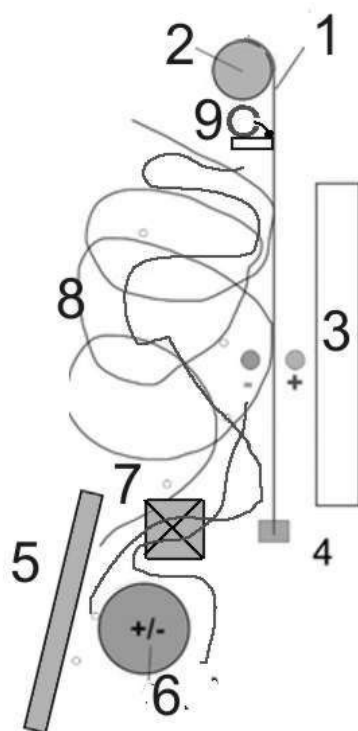
Большинство площадок строений города, в том числе вертикально ориентированных, облучаются солнечной энергией малую часть суток и могут быть использованы для выработки энергии на 10-30% от установочной мощности, раз-

мещённых на них панелей. По этой причине делать из крыши и фасада жилого дома солнечную электростанцию, для электроснабжения дома крайне нерентабельно. В предшествующие два десятилетия изучались и проектировались комбинированные PVT системы [3 -18] призванные поднять эффективность преобразования солнечной энергии за счёт улавливания ещё и тепловой энергии, и повышение эффективности преобразования фотоэлектрической, за счёт снижения температуры фотопреобразователей. Окупаемость миниэлектростанции на дому с такими панелями, по расчётам в [11] составит 35 лет, даже при больших Шведских ценах на энергию. Принципиальное отличие проводимыми авторами работы в социальном и экономическом плане заключается в том, что индивидуальному потребителю предлагается не энергия от электростанции, а бытовое устройство с солнечными батареями с комбинацией светодиодного осветителя и регулирующей солнечный свет внешней жалюзи., очистителя воздуха, звуко и теплоизолятора, кондиционера [20-24] Попутно оно поможет решить и глобальные общечеловеческие проблемы экологии, за счёт очистки воздушной среды от смога и пользоваться «зелёной» энергией. Одной из важнейших дополнительных функций бытового устройства с солнечными панелями является пылесосование [22]. Такое устройство может управлять площадью оконного проёма жилых помещений размером 3-5 квадратных

метра и улавливать мелкодисперсную пыль. В крупных городах Казахстана и России запылённость воздуха – это злободневная проблема. Например, в России дополнительная смертность от загрязнения воздуха мелкодисперсной пылью с размерами менее 10 и 2.5 мкм (PM10 и PM2.5) оценивается в СМИ цифрой 40 тысяч человек ежегодно.

### Результаты и обсуждения

Модель для расчёта устройства оконного пылесобирания представлена на рисунке 1. В качестве улавливающих пыль устройств может выступать шторка 1 с наружной диэлектрической поверхностью, пластина закрывающая солнечные панели или растительную пластину, а также сама растительная панель. Растительная панель дополнительно будет улавливать и парниковый углекислый газ. Опущенная с помощью рулонного механизма 2 шторка закрывает окно 3. Мимо неё солнечной панелью 5 и вентилятором 7 продувается турбулентный поток воздуха 8.



1 – пылесобирающая шторка; 2 – рулонный механизм;  
3 – оконный проём; 4 – грузик шторки;  
5 – солнечная панель; 6 – зарядный электрод-турболизатор;  
7 – вентилятор; 8 – траектория движения пыли  
в восходящем воздухе; 9 – смывающий пыль дворник

**Рисунок 1** – Схема улавливания мелкодисперсной пыли

На заряжающем электроде 6 формируется высокое напряжение 100-1200 В отрицательного или положительного знака. Пролетающие мимо электрода с потоками восходящего воздуха пылинки притягиваются к электроду и в момент касания приобретают заряд. Знак заряда и его величина зависят от нескольких факторов. Если пылинка создана из диэлектрического материала с большим поверхностным сопротивлением, то частичка зарядится до очень малой доли от заряда определяемой её ёмкостью. Эта доля зависит от времени касания частицы к металлическому электроду. Эта доля зависит от материала частицы. Для стеклянного материала (песок) поверхностное сопротивление сферической частицы  $R_s$  во влажном воздухе составляет  $10^{11}$ - $10^{12}$  Ом. Напряжение, до которого частица зарядится, определяется по формуле

$$U_t = U(1 - e^{-t/\tau}), \quad (1)$$

где  $\tau$  – характеристическое время заряда частицы, которое рассчитывается как

$$\tau = C_p \cdot R_s, \quad (2)$$

где  $C_p$  – ёмкость сферической частицы. Для того, чтоб определить ёмкость частицы воспользуемся формулой (3)

$$C_p = 4 \pi \epsilon \epsilon_0 r_p, \quad (3)$$

где  $r_p$  – радиус сферической пылинки.

Для диэлектрической частицы (пылинки) радиусом  $r_p = 1$  мкм ёмкость составит величину  $C_p = 1.1 \cdot 10^{-16}$  Ф, а  $\tau = 1.1 \cdot 10^{-4}$  с. При скорости восходящего потока  $v_b = 0.1$  м/с пылинка удалится на расстояние равное  $r_p$  за время  $t = 10^{-5}$  с. Напряжение до которого зарядится наночастица составит примерно  $U_t = U(t/\tau)$ .

Таким образом, заряд диэлектрической частицы можно посчитать по соотношению :

$$Q_p = C_p \cdot U_t = \frac{U \cdot r_p}{v_b \cdot R_s} \quad (4)$$

Для частицы с радиусом  $r_p = 1$  мкм и скорости  $v_b = 0.1$  м/с, заряд составит  $Q_p = 2.5 \cdot 10^{-15}$  Кулон, а для скорости  $v_b = 1$  м/с,  $Q_p = 2.5 \cdot 10^{-16}$  Кл.

Для графитовой частицы (частицы гари) характеристическое время заряда на 6-7 порядков меньше и поэтому ёмкость частицы заряжается полным зарядом. Для частицы с радиусом  $r_p = 1$  мкм независимо от скорости восходящего потока заряд составит величину  $Q_p = 3.3 \cdot 10^{-14}$  Кл.

Рассчитаем силу притяжения и скорость перемещения пылинки к плёнке. Расчёт ведём методом изображения [19]. Сила притяжения между реальным зарядом и зарядом-изображением определяется по закону Кулона:

$$F = k \frac{Q_p \cdot |Q_p'|}{(2a)^2} = k \frac{Q_p^2}{4a^2} \cdot \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2} \quad (5)$$

где  $k = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} = 9 \cdot 10^9 \text{ Н} \cdot \text{м}^2 / \text{Кл}^2$  электрическая постоянная, диэлектрическая проницаемость плёнки  $\varepsilon_1 = 2.3$ ,  $\varepsilon_2 = 1$ ,  $a$  – расстояние от пылинки до плёнки. Скорость перемещения  $\vartheta_{от}$  сферической частицы к плёнке зависит от вязкости воздуха и силе, приложенной к частице считывается с помощью формулы

$$\vartheta_{от} = \frac{F}{6\pi r_p \eta} \quad (6)$$

где  $\eta = 18.2 \cdot 10^{-6} \text{ Па} \cdot \text{с}$  – динамическая вязкость воздуха.

Для графитовой пылинки диаметром 1 мкм, скорость перемещения частицы с расстояния 10 мм от плёнки составит всего  $\vartheta_{от} = 3 \cdot 10^{-5} \text{ м/с}$ . Для диэлектрических частиц на порядок меньше. Значит, при ламинарном течении воздуха около плёнки пыль практически не будет осаждаться на плёнку. С другой стороны, с расстояния 10 мкм до плёнки даже диэлектрическая частица устремится к плёнке со скоростью 0.15 м/с. Значит, сила прилипания пылинки достаточно большая и она удержится на плёнке.

Для того чтобы пыль подходила к плёнке на очень близкое расстояние и захватывалась ей, необходимо создать слой воздуха с турбулентным перемещением струй. Заряжающий электрод в виде цилиндра, помещённого на пути восходящего потока воздуха, и вентилятор 7 призваны создать такое перемещение струй воздуха. Пылинки со слоя толщиной примерно в 1.5 раза большей диаметра электрода-турбулизатора 6 по рисунку 1 будут периодически подлетать к плёнке. Заряженные частички пыли прилипнут к плёнке, а нейтральные проследуют за потоками воздуха. Таким образом, турбулизированный слой воздуха, толщиной равной зазору между панелью и стенкой в нижней части устройства будет очищаться от пыли. Необходимое условие – прилипшая за счёт электростатики пыль не должна сдуваться потоками воздуха, в том числе порывами ветра. Необходимо рассчитать зависимость скорости допустимых потоков воздуха, при которой прилипшие пылинки останутся на плёнке. Для этого сначала нужно определить

как спадает скорость потока воздуха у поверхности с учетом, что на границе поверхности за счёт сил атомного сцепления молекул воздуха и плёнки скорость молекул равна нулю. На некотором расстоянии  $h$  от границы она становится такой же, как и в свободном пространстве. Это расстояние называется пограничным слоем и скорость в нём меняется от нулевой до  $\vartheta_0$  – скорости свободного потока воздуха по линейному закону. Толщину этого пограничного слоя можно посчитать, рассматривая движение кубика воздуха с высотой  $h$ , расположенного на поверхности плёнки, как это показано на рисунке 2. Средняя скорость кубика воздуха  $\vartheta_0/2$  остаётся равномерной, значит, сила напора воздуха  $F_v$  на левую грань уравнивается силой трения  $F_{тр}$ , приложенной к верхней грани.

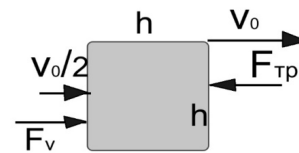


Рисунок 2 – Графическое изображение к расчёту толщины пограничного слоя воздуха

Сила напора считается по формуле

$$F_v = \frac{h^2 \cdot \rho \cdot (\frac{\vartheta_0}{2})^2}{2} = \frac{(h^2 \cdot \rho \cdot \vartheta_0^2)}{8} \quad (7)$$

Сила внутреннего трения воздуха считается по формуле

$$F_{тр} = h^2 \cdot \eta \cdot \vartheta_0 / h \quad (8)$$

Таким образом,

$$\frac{(h^2 \cdot \rho \cdot \vartheta_0^2)}{8} = h^2 \cdot \eta \cdot \vartheta_0 / h \quad (9)$$

Отсюда

$$h = 8 \cdot \eta / \vartheta_0 \cdot \rho \quad (10)$$

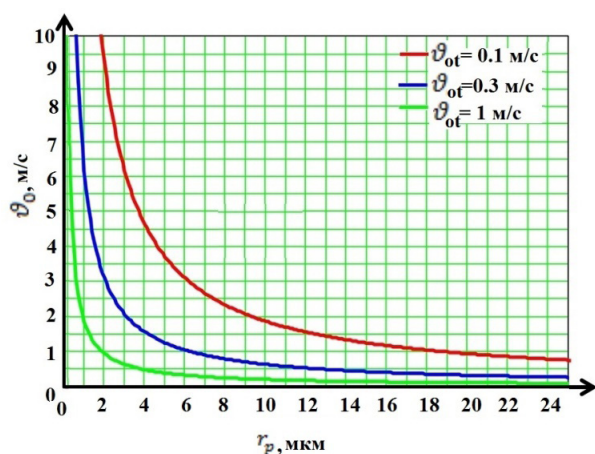
Так, при скорости ветра 10 м/с, толщина пограничного слоя  $h$  составит величину  $1.2 \cdot 10^{-5} \text{ м}$ . Следовательно, если плёнка с прилипшей частицей радиусом  $r_p$  обдувается ветром  $\vartheta_0$ , то скорость воздуха, набегающего на частицу, будет равна:

$$\vartheta_p = \frac{\vartheta_0 \cdot r_p}{h} = \frac{r_p \cdot \vartheta_0^2 \cdot \rho}{8 \cdot \eta} \quad (11)$$

При скорости сдувающего ветра 10 м/с на частицу с  $r_p = 1$  мкм будет воздействовать воздушный поток скоростью 0,83 м/с.

Чтобы пылинка не оторвалась от плёнки, необходимо, чтобы сила электростатического сцепления пылинки с плёнкой, рассчитанная по соотношению (9), была больше силы воздушного напора, рассчитанной по соотношению (10). Поскольку с течением времени плёнка заряжается, электростатическая сила убывает пропорционально разности потенциалов заряжающего электрода и поверхности плёнки. Заряд от пылинок частично растекается по телу плёнки и проникает на противоположную от пылинки сторону. Таким образом, пылинка, заряженная электродом 6 (рисунок 1), будет иметь заряд, соответствующий разности потенциалов между плёнкой и заряжающим электродом.

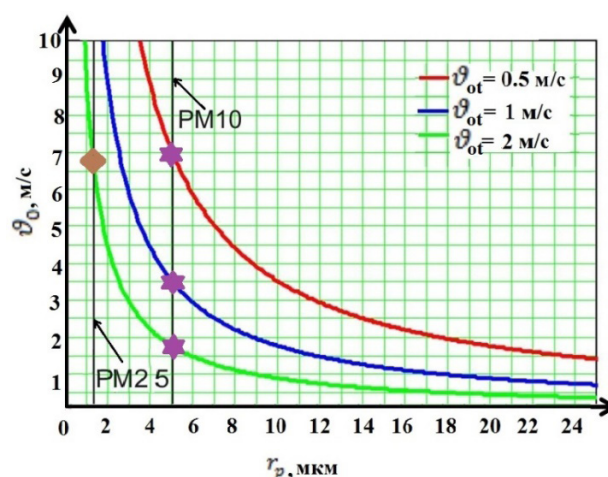
На рисунке 3 показана зависимость скорости ветра, отрывающего диэлектрическую пылинку и металлическую пылинку, от размера пылинки. Графики построены для случая, когда упомянутая разность потенциалов достигла 100 В.



**Рисунок 3** – Зависимость скорости ветра  $v_0$  отрывающей пылинку от размера пылинки при напряжении  $U=100$  В на электроде при различных скоростях перемещения пылинки к плёнке  $v_{от}$

Согласно рисунку 3, для металлической пылинки с полным зарядом своей ёмкости, даже огромные по меркам пылесобирания частицы диаметром 20 мкм не будут сдуваться порывами ветра до 5 м/с. А вот не полностью заряженные

диэлектрические пылинки, даже небольшого размера, будут сдуваться тем восходящим потоком, который их доставил к поверхности. Например, если скорость восходящего потока, доставившего пылинку к плёнке, будет 1 м/с, то пылинки радиусом больше 2 мкм не будут прилипать к плёнке. Для того, чтобы прилипание диэлектрических и металлических пылинок всё же состоялось, необходимо увеличить разницу потенциалов. На рисунке 4 показан вариант зависимости скоростей ветра от размера пылинок при разнице потенциалов на электроде  $U=1000$  В.

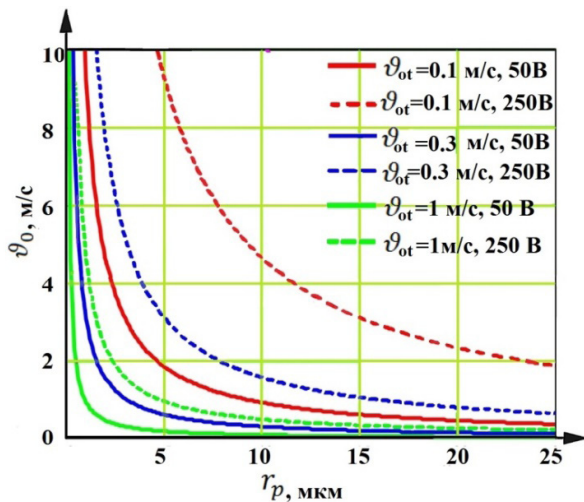


**Рисунок 4** – Зависимость скорости ветра  $v_0$  отрывающей пылинку от размера пылинки при напряжении  $U = 1000$  В на электроде при различных скоростях перемещения пылинки к плёнке  $v_{от}$

На рисунке 5 показаны семейства кривых для двух разниц потенциалов: 50 и 250 В. При напряжении 250 Вольт и скорости восходящего потока 1 м/с будут прилипать частицы до 5 мкм, а при 50 В – только до 1 мкм. Связано это с тем, что заряд на диэлектрическую частицу поступает по огромному поверхностному сопротивлению её поверхности и не успевает полностью её зарядить.

В реальной ситуации несферических диэлектрических частиц для отрыва частиц требуется меньшая скорость ветра. Для того, чтобы увеличить эту скорость, необходимо увеличить напряжение.





**Рисунок 5** – Семейство зависимостей скорости ветра отрывающего пылинки, от размера пылинок при разных потенциалах плёнки при различной скорости перемещения пылинки к плёнке  $v_{0t}$

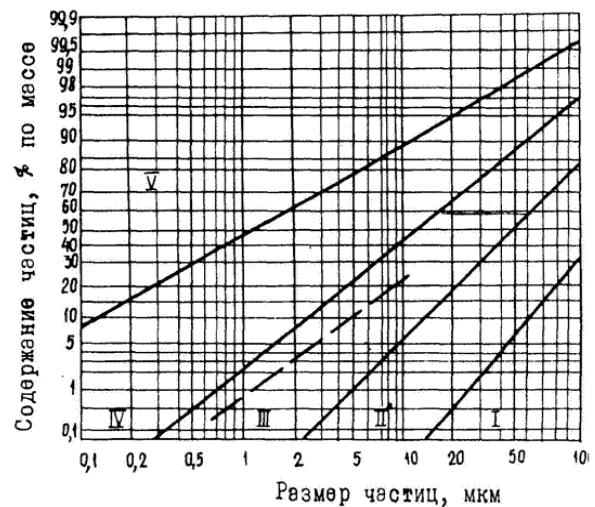
Рассчитаем продолжительность цикла сбора пыли. Очевидно, с момента появления потенциала на электроде на плёнку натекает электрический заряд, который будет обеспечиваться движением заряженных пылинок. Этот ток будет пропорционален объёму воздуха, прошедшего в единицу времени мимо плёнки и количеству электричества в нём. Объём воздуха с зарядами, прошедший мимо плёнки в единицу времени, определяется выражением

$$V = v_0 \cdot D_t \cdot A \cdot k, \quad (12)$$

где  $v_0$  – скорость восходящего потока ( $\sim 1$ ),  $D_t$  – диаметр турбулелазаторов,  $A$  – длина щели турбулелазаторов (для окна  $D \sim 0.1$  м,  $A \sim 1,5$ ),  $k$  – эффективность сбора частичек пыли плёнкой (принимаем 0.5).

Тогда эффективный объём в секунду  $V = 0.075 \text{ м}^3/\text{с}$ . По нормативам запылённости, приведённым в [25], можно определить максимальное количество пыли в атмосфере города в различных ситуациях. Например, в городе при интенсивном движении автотранспорта запылённость ( $K_{\text{он}}$  – коэффициент запылённости) может составить  $5 \text{ мг}/\text{м}^3$ , при смоге  $K_{\text{он}} = 10 \text{ мг}/\text{м}^3$ . Значит в течение суток можно эффективно очистить объём  $V_{\text{сут}} = 6480 \text{ м}^3$ , а при смоге осадить в сутки 64 грамма пыли.

Если мы примем во внимание данные из [26], приведённой на рисунке 6, в городской атмосфере, то средний радиус пылинок составляет 5 мкм.



- I – очень крупнодисперсная пыль (уголь);
- II – крупнодисперсная пыль (например, мелкий песок для строительных работ);
- III – средне дисперсная пыль (например, цемент);
- IV – мелкодисперсная пыль (например, взвешенная атмосферная пыль);
- V – очень мелкодисперсная пыль (например, автомобильные выхлопы, дым)

**Рисунок 6** – Номограмма распределения пыли по размерам [26]

Согласно номограмме [26], приведённой на рисунке 6, в городской атмосфере средний радиус пылинок 5 мкм. Учитывая пористость структуры пылинок, показанной на рисунке 5, их плотность не превышает  $\rho = 1000 \text{ кг}/\text{м}^3$ . Тогда средняя масса частицы, которая определяется как

$$m_p = \frac{4 \cdot \pi \cdot r_p^3 \cdot \rho}{3}. \quad (13)$$

И в этом случае масса  $m_p = 5.236 \cdot 10^{-13} \text{ кг}$ , а средняя электроёмкость частицы:

$$C_p = 4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot r_p \quad (14)$$

становится равной  $C_p = 5.561 \cdot 10^{-16} \text{ Ф}$ .

Если предположить (в худшем варианте), что половина частиц электризованы и состоят из углерода, а плёнка максимально будет заряжаться до  $U_{\bar{\sigma}} = U_0/2$ , ( $U_0$  – напряжение электрода 6 по рисунку 2,  $U_{\bar{\sigma}} = 1200 \text{ В}$ ) т.е. разница потенциалов между плёнкой и заряжающим электродом упадёт с 1200 до 600В и в среднем составит  $U_{\text{cp}} = 600 \text{ В}$ . В этом случае средняя разница потенциалов между заряженными и нейтральными частицами составит по модулю  $U_{\text{cp}} = 600 \text{ В}$  то заряд средней частицы определяется выражением:

$$Q_p - C_p - U_{cp}. \quad (15)$$

а средний ток, поступающий на плёнку при смоге, можно найти из соотношения:

$$I_{cp} = V \cdot K_{OH} \cdot Q_p / m_p, \quad (16)$$

И, подставив значения в (16), мы получим, что  $I_{cp} = 4.77 \cdot 10^{-7} \text{ А}$ . С учетом затраты такого тока суточные затраты энергии аккумулятора  $E$  составят не меньше 50 Дж

$$E = U_{\text{э}} \cdot I_{cp} \cdot 24 \cdot 3600_c \quad (17)$$

или 12 мВт·часов, что гораздо меньше электронной схемы, генерирующей высокое напряжение. Таким образом, напряжения  $U_{\text{э}} - 600 \text{ В}$  на аккумуляторе и затрат энергии в 50 Дж будет вполне достаточно, чтоб зарядить частицы пыли и не допустить их сдувания воздухом.

### Заключение

Проведено моделирование и обоснован принцип собирания мелкодисперсной пыли вертикальной диэлектрической плёнкой, используемой в бытовом устройстве с солнечными панелями. Проведён расчёт скорости оседания пыли, устойчивости её к сдуванию, длительности активной фазы собирания пыли. Оборудование фасадов зданий устройствами с солнечными батареями, поглощающими уличную пыль защитной плёнкой, будет способствовать улучшению экологической обстановки в городе.

**Благодарности.** Работа была выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан грантом АР05131673.

### Литература

- 1 Байерс Т. 20 конструкций с солнечными элементами. – М.: Мир, 1988. –197 с.
- 2 Твайделл Д. Возобновляемые источники энергии. – М.: Мир, 1990. – 393 с.
- 3 Ning Zh. et al. Development of a Small Solar Power Generation Systembased on Thermoelectric Generator // Energy Procedia. -2014.-Vol. 52. – P. 651–658.
- 4 Ioannou A.K., Stefanakis N.E., and Boudouvis A.G. Design optimization of residential grid-connected photovoltaics on rooftops // Energy Build.- 2014. -Vol. 76. – P.588–596.
- 5 Liu D. and Shiroyama H., Development of photovoltaic power generation in China: A transition perspective // Renew. Sustain. Energy Rev. – 2013. – Vol. 25. – P. 782–792.
- 6 Мейгин М. Фотовольтаика: материалы, технологии, перспективы // Электроника, наука, технология, бизнес. – 2000. – Vol. 6. – С. 40-46.
- 7 Yudelson J. and Meyer U. The world greenest buildings. – Routledge, Abilgdon, 2013. – 257 p.
- 8 Basnet A. Architectural Integration of Photovoltaic and Solar Thermal Collector Systems into buildings. – Reports, Trondheim, 2012. – 112 p.
- 9 Martins D.C. Analysis of a Three-Phase Grid-Connected PV Power System Using a Modified Dual-Stage Inverter // Renewable Energy. – 2013. -Vol. 2013. – P.406312-406330.
- 10 Pearce J., Debnath S., and Vora A. Combined photovoltaic solar thermal systems (PVT) – literature review. – MY 5970/EE 5900-Solar Hacking: Photovoltaic Materials, Cells and Systems Engineering, Houghton, 2012. – 40 p.
- 11 Moheimani N.R. and Parlevliet D. Sustainable solar energy conversion tochemical and electrical energy // Renew. Sustain. Energy Rev. – 2013, -Vol 27. – P 494-504.
- 12 Hasan O. and Arif A. Performance and life prediction model for photovoltaic modules: Effect of encapsulant constitutive behavior // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2014. – Vol 122. – P. 75–87.
- 13 Roos F. Proc of China's International Conference for the Solar Industry. – Beijing, December 11-13, 2012. – P. 68-84.
- 14 Boonstra C. Proc of China's International Conference for the Solar Industry. – Beijing, December 11-13, 2012. – P. 92-112.
- 15 Huy A., Ahn S., Han S., et al. Effective optimization of indium tin oxide films by a statistical approach for shallow emitter based crystalline siliconsolar cell applications // Sol. Energy Mater. Sol. Cells.- 2014. -Vol 125. – P. 176–183.
- 16 Andrews, and J.M. Pearce, Effects of spectral albedo on solar photovoltaic devices // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2014. –Vol. 124. – P. 111–116.
- 17 Eltawil och Z. M.A. Zhao Grid-connected photovoltaic power systems:Technical and potential problems—A review // Renew. Sustain. Energy Rev. – 2010. – Vol.14, №1. – P. 112–129.
- 18 Skoplaki E., Boudouvis A.G., and Palyvos J.A., A simple correlation for the operating temperature of photovoltaic modules of arbitrary mounting // Sol. Energy Mater. Sol. Cells. – 2008. –Vol. 92, №11. – P.1393–1402.
- 19 Фейнман Р., Лейтон Р., и Сэндс М. Фейнмановские лекции по физике. Том 5: Электричество и магнетизм. – М.: Эдиториал УРСС, 1960. – С.291.

- 20 Mikhaylov L., Mikhaylova S., Ismailova G., et al. // Proc of 15-th International Multidisciplinary Scientific Geo-Conference & EXPO – SGEM. – Bulgaria, 17-24 June, 2015. – P.68-74.
- 21 Mikhailov L., Mikhailova S., Ismailova G. et al. Development of energy devices based on photovoltaic panels with extra consumer properties // Mediterranean Green Buildings & Renewable Energy. – 2017. – P. 609–617.
- 22 Михайлов Л.В., Мамишев Д.Р., Куатова М.Ж. и др. // Сборник научных статей VI Международной научно-практической конференции. – Барнаул, 11-12 марта 2016 г. – С. 226-229.
- 23 Михайлов Л.В., Мамишев Д.Р., Султангазина М.Н. и др. // Сб. научных статей VII Междун. научно-практ. конф. «Многоядерные процессоры, параллельное программирование, ПЛИС, системы обработки сигналов». – Барнаул, 10-11 марта 2017 г. – С. 237-243.
- 24 Михайлов Л.В., Сидляров А.М., Габдулова Н.С. и др. Мехатронная система смарт окна с использованием солнечных панелей // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии. – 2018. -Том 8, №1. – С. 172-176.
- 25 Долина П.А. Справочник по технике безопасности. – М.: Энергия, 1990. – 824 с.
- 26 Чекман И.С., Сыровая А.О., Андреева С.В., Макаров В.А. Аэрозоли – дисперсные системы: Монография. – Киев – Харьков: Цифрова друкарня. – 2013. – №1. – 100 с.

### References

- 1 T. Bayyers, 20 konstruksiyi s solnechnymi elementami, (Mir, Moskva, 1988), 197 p. (in Russ.).
- 2 D. Tsvaydell, Vozobnovlyayemyye istochniki energii, (Mir, Moskva, 1990), 393 s. (in Russ.).
- 3 Zh. Ning et al., Energy Procedia, 52, 651 – 658 (2014).
- 4 A.K. Ioannou, N.E. Stefanakis, and A.G. Boudouvis, Energy Build, 76, 588–596 (2014).
- 5 D. Liu and H. Shiroyama, Renew. Sustain. Energy Rev., 25, 782–792 (2013).
- 6 M. Meytin Fotovoltaika: materialy, tekhnologii, perspektivy, 6, 40-46 (2000). (in Russ.).
- 7 J. Yudelson and U. Meyer, The world greenest buildings, (Routledge, Abildon, 2013), 257 p.
- 8 A. Basnet, Architectural Integration of Photovoltaic and Solar Thermal Collector Systems into buildings, (Reports, Trondheim, 2012), 112 p.
- 9 D.C. Martins, Renewable Energy, 2013, 406312-406330 (2013).
- 10 J. Pearce, S. Debnath, and A. Vora, Combined photovoltaic solar thermal systems (PVT) – literature review (MY 5970/EE 5900-Solar Hacking: Photovoltaic Materials, Cells and Systems Engineering, Houghton, 2012), 40 p.
- 11 N.R. Moheimani and D. Parlevliet, Renew. Sustain. Energy Rev., 27, 494-504 (2013).
- 12 O. Hasan and A. Arif, Sol. Energy Mater. Sol. Cells, 122, 75–87 (2014).
- 13 F. Roos, Proc. of China's International Conference for the Solar Industry (Beijing, December 11-13, 2012), p. 68-84.
- 14 C. Boonstra, Proc of China's International Conference for the Solar Industry (Beijing, December 11-13, 2012), p. 92-112.
- 15 A. Huy, S. Ahn, S. Han, et al., Sol. Energy Mater. Sol. Cells, 125, 176–183 (2014).
- 16 Andrews, and J.M. Pearce, Sol. Energy Mater. Sol. Cells. 124, 111–116 (2014).
- 17 M.A. Eltawil och Z. Zhao, Renew. Sustain. Energy Rev. 14 (1), 112–129 (2010).
- 18 E. Skoplaki, A.G. Boudouvis, and J.A. Palyvos, Sol. Energy Mater. Sol. Cells, 92 (11), 1393–1402 (2008).
- 19 R. Feynman, R. Leyton, and M.Sends, Feynmanovskiye lektsii po fizike. Tom 5: Elektrichestvo i magnetizm. (Moskva, Editorial URSS, 1960), p. 291. (in Russ.).
- 20 L.V. Mikhaylov, S. Mikhaylova, and G.Ismailova, et al., Proc of 15-th International Multidisciplinary Scientific Geo-Conference & EXPO – SGEM (Bulgaria, 17-24 June, 2015), p. 68-74.
- 21 L.V. Mikhailov, S. Mikhailova, G. Ismailova et al., Mediterranean Green Buildings & Renewable Energy, 609 – 617 (2017).
- 22 L.V. Mikhaylov, D.R. Mamishev, M.Zh. Kvatova, et all. Sbornik nauchnykh statey VI Mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii (Barnaul, 11-12 March 2016), p. 226-229. (in Russ.).
- 23 L.V. Mikhaylov, D.R. Mamishev, M.N. Sultangazina, et al., Cb. nauchnykh statey VII Mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii Mnogoyadernnyye protsessory, parallel'noye programmirovaniye, PLIS, sistemy obrabotki signalov (Barnaul, 10-11 March 2017), p. 237-243. (in Russ.).
- 24 L.V. Mikhaylov, A.M. Sidlyarov, N.S. Gabdulova, et al., Vysokoproizvoditel'nyye vychislitel'nyye sistemy i tekhnologii, 8 (1), 172-176 (2018). (in Russ.).
- 25 P.A. Dolina, Spravochnik po tekhnike bezopasnosti, (Energiya, Moskva, 1990), 824 p. (in Russ.).
- 26 I.S. Chekman, A.O. Syrovaya, S.V. Andreyeva, and V.A. Makarov, Aerozoli – dispersnyye sistemy: Monografiya, (Tsifrova drukarnya, Khar'kov, 2013, No 1), 100 p. (in Russ.).

**Чучвага Н.А. \*, Кислякова Н.М., Аймаганбетов К.П.,  
Рақыметов Б.А., Токмолдин Н.С.**

Казахский национальный исследовательский технический университет им. К.И. Сатпаева,  
ТОО «Физико-технический институт», Казахстан, г. Алматы,  
\*e-mail: nikolay.chuchvaga@gmail.com

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВЛАЖНОЙ ХИМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА ПОВЕРХНОСТЬ КРЕМНИЕВЫХ МОНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛАСТИН**

В ходе выполнения работ были проведены эксперименты по влажной химической обработке монокристаллических кремниевых пластин. Были получены образцы монокристаллических кремниевых пластин после различных этапов влажной химической обработки и измерены времена жизни неосновных носителей в данных образцах. Помимо исследования влияния каждого шага химической чистки на свойства пластин монокристаллического кремния были проведены опыты направленные на изучение влияния различных рецептов влажной химической чистки кремниевых пластин на время жизни неосновных носителей заряда (ННЗ) и коэффициента отражения света от поверхности образцов. Были выбраны несколько рецептов метода влажной химической обработки. А именно, изменялась концентрация травящего раствора и время травления в данной методике, а затем проводились измерения образцов. Результаты исследований показали, что увеличение времени жизни ННЗ в пластинах начинается со стадии травления нарушенного слоя, в то время как само обезжиривание на время жизни ННЗ влияния не оказывает. Также, было показано, что важную роль играет очищение поверхности от металлов и финальная обработка в плавиковой кислоте. Выявлено, что для достижения лучших результатов травления гораздо эффективнее увеличивать время обработки пластин в растворе нежели концентрацию щёлочи.

**Ключевые слова:** фотовольтаика, аморфный кремний, НИТ, фотоэлемент, пассивация

Chuchvaga N.A. \*, Kislyakova N.M., Aimagambetov K.P.,  
Rakymetov B.A., Tokmoldin N.S.

K.I. Satpayev Kazakh National Technical University,  
Institute of Physics and Technology, Kazakhstan, Almaty,  
\*e-mail: nikolay.chuchvaga@gmail.com

### **A study of the effects of wet chemical treatment on the surface of monocrystalline silicon wafers**

In the course of the work, experiments on wet chemical treatment of single-crystal silicon wafers were carried out. Samples of monocrystalline silicon wafers after various stages of wet chemical treatment were obtained and the lifetimes of non-basic carriers in these samples were measured. In addition, we studied the effect of each step of dry cleaning on the properties of single-crystal silicon wafers, experiments were conducted to study the effect of various recipes for wet dry cleaning of silicon wafers on the lifetime of non-basic charge carriers and the reflection coefficient of light from the surface of the samples. A few recipes of the method of wet chemical processing was selected. Namely, the concentration of the etching solution and the etching time were changed in this technique, and then the samples were measured. The results of studies have shown that the increase in the lifetime of non-basic charge carriers in the plates begins with the etching stage of the disturbed layer, while the degreasing itself has no effect on the lifetime of non-basic charge carriers. Also, it was shown that an important role is played by the purification of the surface from metals and the final treatment in hydrofluoric acid. It was found

that to achieve better etching results it is much more effective to increase the time of plate treatment in solution than the concentration of alkali.

**Key words:** photovoltaics, amorphous silicon, HIT, solar cell, passivation.

Чучвага Н.А.\*, Кислякова Н.М., Аймағанбетов К.П.,  
Рақыметов Б.А., Токмолдин Н.С.

Қ.И. Сәтбаев атындағы Қазақ ұлттық техникалық университеті,  
«Физика-техникалық институт» ЖСШ, Қазақстан, Алматы қ.,  
\*e-mail: nikolay.chuchvaga@gmail.com

### Монокристаллды кремнийлі пластинасының бетіне химиялық ылғалды өңдеу әсерін зерттеу

Жұмыста монокристаллды кремнийлі пластиналарды дымқыл химиялық өңдеу бойынша эксперименттер жүргізілді. Монокристаллы кремнийлі пластиналардың үлгілері ылғал химиялық өңдеудің әртүрлі кезеңдерінен кейін алынды және осы үлгілердегі азшылықты тасымалдаушылардың өмірі өлшеді. Монокристаллы кремнийлі пластиналардың қасиеттері бойынша құрғақ тазалаудың әр сатысының әсерін зерттеуден басқа, минералды заряд тасымалдаушылардың өмір сүру мерзіміне кремнийлі пластиналардың әртүрлі сулы химиялық тазалау рецептілерінің әсерін зерттеуге және үлгілердің бетіндегі жарықтың көрсетілуіне бағытталған эксперименттер жүргізілді. Ылғалды химиялық өңдеу үшін бірнеше рецепт таңдалды. Атап айтқанда, осы техникада ерітінді ерітіндісінің концентрациясы және қайнату уақыты өзгертілді, содан кейін үлгілер өлшенді. Зерттеу нәтижелері монокристаллды пластинадағы негізгі емес заряд тасымалдаушылардың өмір сүру қасиетінің артуы, өңдеу жұмыстарын жүргізу кезіндегі қабаттардың бұзылуы арқылы басталатынын, алайда өңдеу үрдісімен майсыздандыру кезінде, өмір сүру қасиетіне әсер етпейтінін көрсетті. Сондай-ақ, пластинаның бетін металдардан тазарту және соңғы өңдеуді фтор сутегі ерітіндісімен жүргізу жұмыстары, маңызды рөл болып саналады. Сонымен қатар, көрсетілгендей, ең жақсы өңдеу нәтижелеріне қол жеткізу үшін, сілтілердің концентрациясын ұлғайтқанға қарағанда, пластиналардың сілтілі ерітіндідегі өңдеу уақытын ұлғайтуы әлдеқайда тиімді болып келеді.

**Түйін сөздер:** фотовольтаика, аморфты кремний, HIT, фотоэлемент, пассивтеу.

## Введение

Первые кремниевые ФЭП изготавливались с использованием кристаллических подложек *n*-типа проводимости, однако, вскоре был совершён переход на использование подложек *p*-типа проводимости, так как он более устойчив к космической радиации [1]. Но для использования ФЭП в условиях атмосферы Земли это не играет большой роли, поэтому со временем в процессе улучшения технологии ФЭП структуры HIT, начали снова использовать кристаллические подложки *n*-типа проводимости. Это связано с тем, что время жизни неосновных носителей в пластинах *n*-типа проводимости, произведённых методом Чохральского, больше нежели у пластин *p*-типа проводимости. Также, под действием солнечного излучения в пластинах *p*-типа проводимости примеси бора могут вступать в реакции с кислородом или железом [2].

При низкотемпературных процессах монокристаллический кремний выглядит более предпочтительным материалом, нежели поликристаллический, так как при низких температурах не происходит геттерирования примесей

и гидрирования дефектов, что должно способствовать увеличению качества в объёме поликристаллического материала [3,4]. Также, из-за более высокой степени ориентации на подложке монокристаллического кремния происходит должно происходить более качественное осаждение тонких плёнок.

Для уменьшения внешнего отражения света от поверхности ФЭП и улучшения внутреннего отражения на пластинах делается текстурирование поверхности. На одной из стадий влажной химической очистки пластин производится текстурирование – травление слоёв кремния в направлении (111), так, чтобы на поверхности монокристаллической кремниевой пластины получились пирамидки. Поэтому для производства ФЭП предпочтительней использовать кремниевые пластины с ориентацией (100) [5,6]. Высота пирамид обычно составляет около нескольких микрон, одновременно с текстурированием или непосредственно до его проведения производят травление поверхности от нарушенного слоя, образовавшегося при резки слитка на пластины.

Так как методы магнетронного распыления и PECVD чувствительны к качеству поверх-

ности подложки, то важно чтобы пирамидки получились одинаковыми с гладкими поверхностями. В работе [7] показано, что плёнки аморфного кремния, нанесённые на текстурированные пластины более чем в полтора раза тоньше, чем плёнки, нанесённые на гладкие плоские поверхности. Можно заметить, что на поликристаллических кремниевых пластинах в процессе текстурирования образуются впадины U-образной формы.

Для финальной очистки от загрязнений, а также травления оксида кремния с поверхности используют плавиковую кислоту (HF), что позволяет получить необходимую для качественного осаждения аморфных плёнок поверхность [8,9]. Полный метод очистки пластины включает в себя обезжиривание в перекиси водорода (окисление) и щёлочи (удаление оксида), промывку водой, травление нарушенного слоя в щёлочи, очистку от металлов в кислотах и удаление оксидной плёнки в плавиковой кислоте [10]. Во время процесса окисления вместе захватываются загрязнения поверхности, которые потом травлятся вместе с оксидной плёнкой во время процесса восстановления. Стоит отметить, что важным условием для получения качественной пассивации является минимальное время между химической обработкой пластин и осаждением слоёв аморфного кремния.

Целью исследования является определение влияния условий обработки поверхности кремниевых пластин и качества поверхности, достигаемого при осаждении пассивирующих слоёв аморфного гидрогенизированного кремния собственной проводимости (a-Si:H).

В данной работе авторским коллективом представлены измерения времени жизни неосновных носителей заряда, спектры отражения света от поверхности пластин, а также снимки поверхности образцов выполненные сканирующим электронным микроскопом. Был проведён анализ результатов и сделаны выводы.

### Образцы и методика эксперимента

В ходе эксперимента образцы коммерческих кремниевых пластин n-типа проводимости с заявленным поверхностным сопротивлением 1-50 Ом/квадрат погружали в ёмкости с растворами кислот, щелочей, деионизированной водой для проведения влажной химической обработки согласно выбранной технологии. Результаты этой обработки исследовались на приборе для изме-

рения времени жизни неосновных носителей заряда методом Синтона.

Методов влажной химической очистки состоит из следующих шагов:

1. Очистка кремниевой пластины от органических соединений в растворе KOH/H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (формирует оксидный слой, а затем травит его).

2. Промывание водой.

3. Травление нарушенного слоя в растворе KOH (формирует оксид кремния, а затем травит его с образованием K<sub>2</sub>SiO<sub>3</sub>+H<sub>2</sub>).

4. Промывание водой.

5. Очистка от металлов в растворе HF/HCl.

6. Промывание водой.

7. Процесс оксидирования в растворе HNO<sub>3</sub> (Si + 4HNO<sub>3</sub> = SiO<sub>2</sub> + 4NO<sub>2</sub> + 2H<sub>2</sub>O).

8. Промывание водой.

9. Травление оксидного слоя в растворе HF (травит оксидную плёнку с образованием SiF<sub>4</sub>).

10. Промывание водой.

11. Сушка пластин в сушильном шкафу.

На стадии обезжиривания коммерческие кремниевые квадратные подложки со стороной квадрата 7 см загружали в авторский фторопластовый держатель образцов. Затем, держатель образцов погружался в раствор гидроксида калия малой концентрации и перекиси водорода. После этого процесса образцы промывались бидистиллированной деионизированной водой и производилась сушка в сушильном шкафу фирмы «BINDER». Вода для растворов была получена на «комбинированной мембранной установке серии ДВС-М/1Н(5Н).

На следующей стадии удалялся нарушенный слой с поверхности кремниевых пластин методом травления в щелочной среде. Образцы опускались в сильно концентрированный раствор гидроксида калия, а затем промывались в воде, аналогично предыдущему этапу обработки пластин. Далее, производилась сушка пластин в сушильном шкафу.

После каждой стадии производились измерения времени жизни неосновных носителей заряда в образцах. Перед каждым измерением пластины опускались в слабый раствор плавиковой кислоты для снятия оксидного слоя, образованного в естественной среде.

Результаты измерений показали, что после этапа травления нарушенного слоя описанной методикой время жизни неосновных носителей заряда (ННЗ) в пластинах кремния увеличивается в два-три раза (Таблица 1).

**Таблица 1** – Данные времени жизни ННЗ. Initial – исходный образец. Degreased – обезжиренный. Etched – протравленный. Sample Name – название образца. Lifetime at Spec. MCD – время жизни ННЗ, измеренное при определённом значении концентрации носителей заряда в секундах. Ohm-cm – удельное сопротивление Ом-см. Lifetime/R – отношение времени жизни ННЗ к удельному сопротивлению

Sample Name	Lifetime at Spec. MCD	Ohm-cm	Lifetime/R
initial	2,00E-06	1,17	1,7094E-06
initial	2,00E-06	1,25	0,0000016
initial	2,00E-06	1,25	0,0000016
degreased	2,00E-06	1,26	1,5873E-06
degreased	2,00E-06	1,12	1,78571E-06
Etched +HF	4,00E-06	1,40	2,85714E-06
Etched +HF	4,00E-06	1,42	2,8169E-06
cSC1+etched+cSC1+HCL+HF	8,00E-06	1,32	6,06061E-06
cSC1+etched+cSC1+HCL+HF	9,00E-06	1,29	6,97674E-06
cSC1+etched+HNO3+HF	11E-06	1,33	8,27068E-06
cSC1+etched+HNO3+HF	14E-06	1,30	1,07692E-05
cSC1+etched+HNO3+HF	11E-06	1,31	8,39695E-06

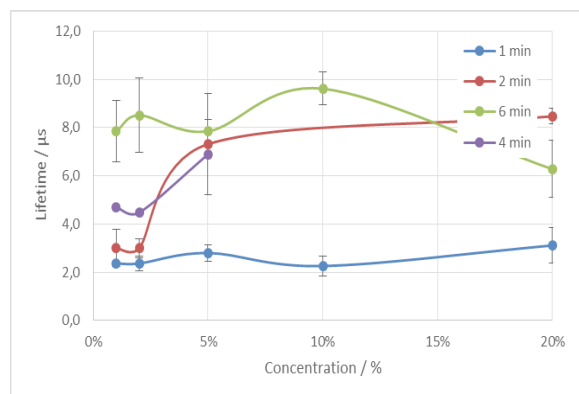
Как видно из таблицы 1 каждый из этапов очистки, начиная с травления увеличивает время жизни ННЗ. В целях экономии места в таблице приведены не все эксперименты, так как результаты остальных экспериментов совпадают с приведёнными в таблице.

Помимо исследования влияния каждого шага химической чистки на свойства пластин монокристаллического кремния были проведены опыты направленные на изучение влияния различных рецептов влажной химической чистки кремниевых пластин на время жизни неос-

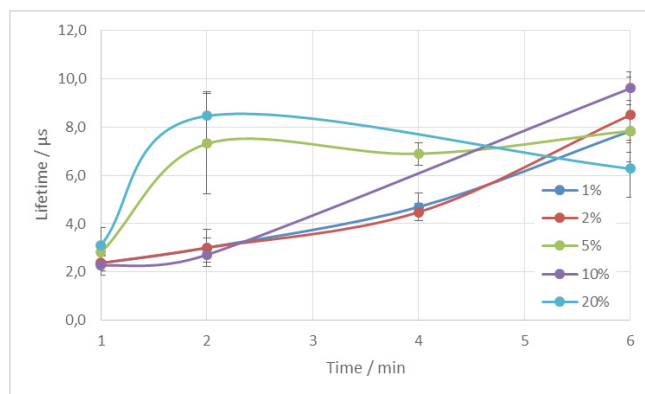
новных носителей заряда (ННЗ) и коэффициента отражения света от поверхности образцов.

Были выбраны несколько рецептов метода влажной химической обработки, который был представлен в предыдущей главе. А именно, изменялась концентрация травящего раствора и время травления в данной методике, а затем проводились измерения образцов.

Эксперименты показали, что ощутимой разницы в приросте времени жизни ННЗ увеличение концентрации кислот в растворах не даёт (рисунки 1-2).



**Рисунок 1** – Зависимость времени жизни ННЗ (Lifetime) от концентрации (concentration) травящего раствора



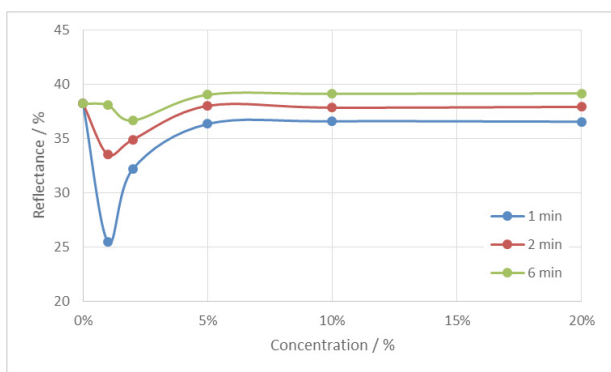
**Рисунок 2** – Зависимость времени жизни ННЗ от времени травления в KOH

Помимо измерения времени жизни ННЗ были так же сняты спектры отражения света от поверхности обработанных пластин. Важно отметить, что в процессе травления необходимо добиться стравливания разрушенного слоя, то есть сделать топоологию пластины более идеальной, что должно привести к увеличению коэффициента отражения света.

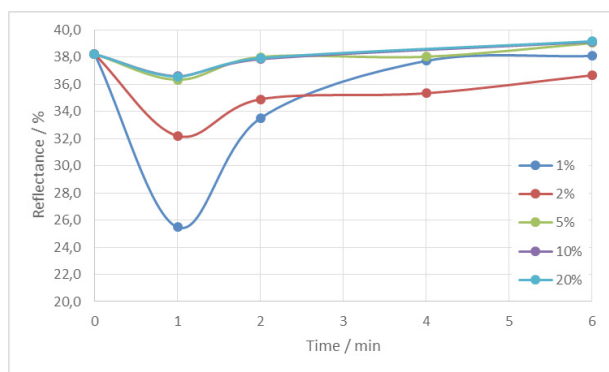
Проведённые опыты показали, что увеличение концентрации кислот в растворах ведёт к увеличению коэффициента отражения (рисунки 3-4). Измерения проведены при использовании установки «PV-measurements». Так же

были исследованы изменения таких величин, как толщина стравленного слоя и сопротивление исследуемых кремниевых монокристаллических пластин (рисунки 5-7). Однако, проделанные эксперименты и затронутые аспекты свойств кремниевых пластин не являются достаточными для определения оптимального рецепта травления.

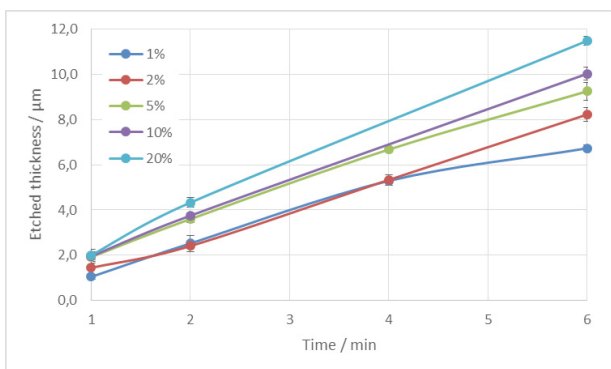
Из рисунков 5-6 можно сделать вывод, что на толщину слоя, стравленного кремния в растворе КОН, в большей степени влияет время травления в щёлочи, нежели концентрация травящего раствора.



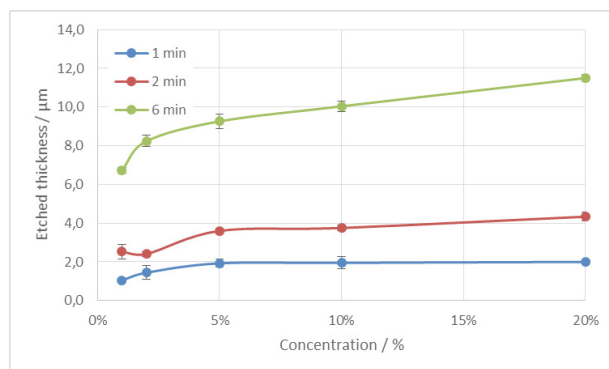
**Рисунок 3** – Зависимость отражения света от поверхности кремниевой пластины от концентрации травящего раствора



**Рисунок 4** – Зависимость отражения света от поверхности кремниевой пластины от времени травления в КОН



**Рисунок 5** – Зависимость толщины стравленного слоя кремниевой пластины от времени травления в растворе

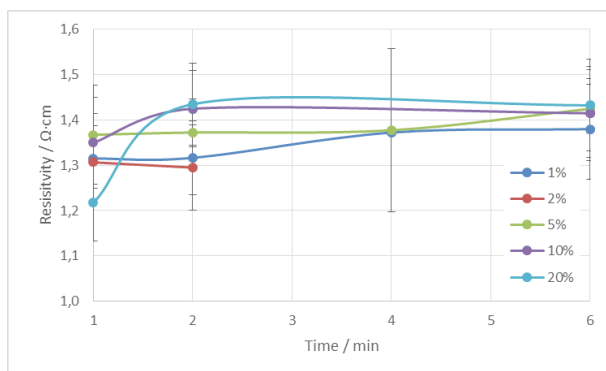


**Рисунок 6** – Зависимость толщины стравленного слоя кремниевой пластины от концентрации травящего раствора

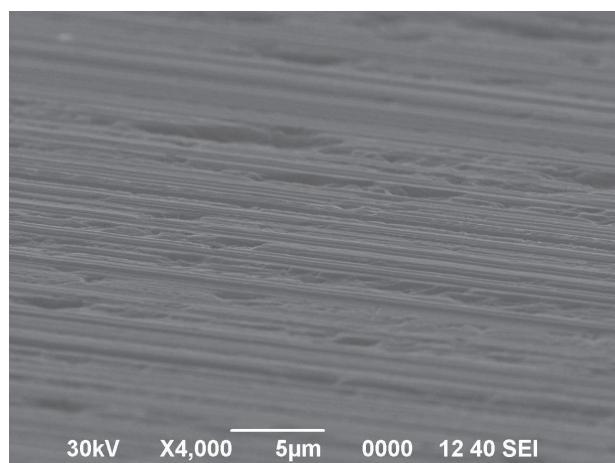
Из рисунка 7 видно, что разброс сопротивления настолько мал, что им можно пренебречь, с учётом того, что разброс значений удельного сопротивления в исходных образцах был анало-

гичен представленному. Изменение топоологии поверхности пластины при травлении были измерены на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) (рис. 8).

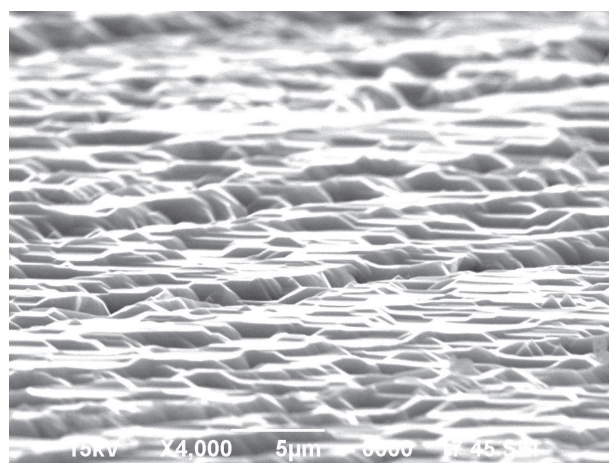




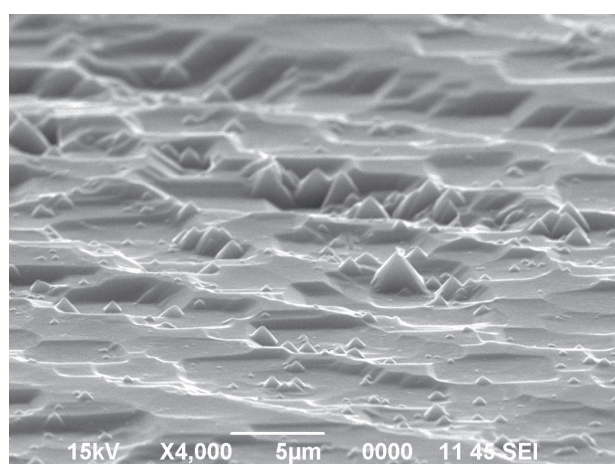
**Рисунок 7** – Зависимость удельного сопротивления кремниевой пластины от времени (Time) травления в растворе в минутах (min)



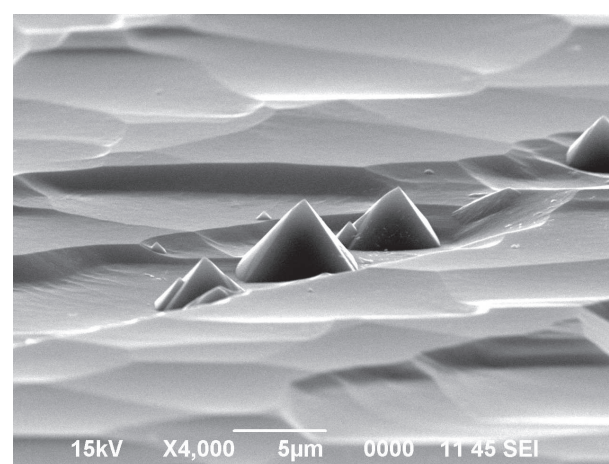
а



б



в



г

а – исходный образец, б – травление в 10% растворе в течение 1-ой минуты, в – травление в 10% растворе в течение 2-х минут, г – травление в 10% растворе в течение 6-ти минут.

**Рисунок 8** – Изображения поверхности кремниевых пластин после травления, полученные при помощи СЭМ

Данные СЭМ подтверждают, что с увеличением времени травления поверхность исследуемых пластин становится более гладкой.

### Заключение

Результаты исследований показали, что увеличение времени жизни ННЗ в пластинах начинается со стадии травления нарушенно-

го слоя, в то время как само обезжиривание на время жизни ННЗ влияния не оказывает. Также, важную роль играет очищение поверхности от металлов и финальная обработка в плавиковой кислоте. Так же было показано, что для достижения лучших результатов травления гораздо эффективнее увеличивать время обработки пластин в растворе нежели концентрацию щёлочи.

### Литература

- 1 Mandelkorn J. et al. Fabrication and Characteristics of Phosphorus- Diffused Silicon Solar Cells // Journal of The Electrochemical Society. – 1962. – Vol. 109. – P. 313.
- 2 Schmidt J., Cuevas A. Electronic properties of light-induced recombination centers in boron-doped Czochralski silicon // J. Appl. Phys. – 1999. – Vol. 86. – P. 3175.
- 3 Myers S., Seibt M., Schroeter W. Mechanisms of transition-metal gettering in silicon // J. Appl. Phys. – 2000. – Vol. 88. – P. 3795–3819.
- 4 Duerinckx F., Szlufcik J. Defect passivation of industrial multicrystalline solar cells based on PECVD silicon nitride // Solar Energy Materials and Solar Cells. – 2002. – Vol. 72. – P. 231–246.
- 5 Seidel H. et al. Anisotropic Etching of Crystalline Silicon in Alkaline Solutions // J. Electrochem. Soc. – 1990. – Vol. 137. – P. 3612.
- 6 Campbell P., Green M.A. Light trapping properties of pyramidally textured surfaces // J. Appl. Phys. – 1987. – Vol. 62. – P. 243–249.
- 7 Olibet S. et al. Properties of interfaces in amorphous/crystalline silicon heterojunctions // Phys. Status Solidi Appl. Mater. Sci. – 2010. – Vol. 207. – P. 651–656.
- 8 Froitzheim A. et al. Interface recombination in heterojunctions of amorphous and crystalline silicon // Journal of Non-Crystalline Solids. – 2002. – Vol. 299-302. – P. 663–667.
- 9 Kern W. Overview and Evolution of Silicon Wafer Cleaning Technology. Handbook of Silicon Wafer Cleaning Technology, 2nd Edition, 2008. – P. 3–92.
- 10 Reinhardt K., Kern W. Handbook of Silicon Wafer Cleaning Technology. (Second Edition). [Online]. – William Andrew Inc., 2008. – 396 p. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/book/9780815515548>.

### References

- 1 J. Mandelkorn et al., Journal of The Electrochemical Society, 109, 313 (1962).
- 2 J. Schmidt, and A. Cuevas, J. Appl. Phys., 86, 3175 (1999).
- 3 S. Myers, M. Seibt, and W. Schroeter, J. Appl. Phys., 88, 3795–3819 (2000).
- 4 F. Duerinckx, and J. Szlufcik, Solar Energy Materials and Solar Cells, 72, 231–246 (2002).
- 5 H. Seidel et al., J. Electrochem. Soc., 137, 3612 (1990).
- 6 P. Campbell, and M.A. Green, J. Appl. Phys., 62, 243–249 (1987).
- 7 S. Olibet et al., Phys. Status Solidi Appl. Mater. Sci., 207, 651–656 (2010).
- 8 A. Froitzheim et al., Journal of Non-Crystalline Solids, 299-302, 663–667 (2002).
- 9 W. Kern, Overview and Evolution of Silicon Wafer Cleaning Technology (Handbook of Silicon Wafer Cleaning Technology, 2nd Edition, 2008), p.3–92.
- 10 K. Reinhardt, and W. Kern, Handbook of Silicon Wafer Cleaning Technology, 2nd Ed. (William Andrew Inc., 2008), p.396. <http://www.sciencedirect.com/science/book/9780815515548>.

## МАЗМҰНЫ – СОДЕРЖАНИЕ

<b>1-бөлім</b>	<b>Раздел 1</b>
<b>Теориялық физика. Ядро және элементар бөлшектер физикасы. Астрофизика</b>	<b>Теоретическая физика. Физика ядра и элементарных частиц. Астрофизика</b>

<i>Dyachkov V.V., Zaripova Yu.A., Yushkov A.V., Shakirov A.L., Bigeldiyeva M.T., Dyussebayeva K.S., Abramov K.E.</i> Study of distribution of beta-pollution in the city of Almaty.....	4
<i>Бекбаев А.К., Азнабаев Д.Т., Коробов В.И., Кемелжанова С.Е.</i> Определение нерелятивистского энергетического спектра молекулярных ионов водорода $H_2^+$ и $HD^+$ .....	11

<b>2-бөлім</b>	<b>Раздел 2</b>
<b>Плазма физикасы</b>	<b>Физика плазмы</b>

<i>Архипов Ю.В., Аскарулы А., Ашикбаева А.Б., Давлетов А.Е., Дубовцев Д.Ю., Сантыбаев Х., Ткаченко И.М.</i> Анализ методов расчета статических характеристик плотных кулоновских систем.....	20
<i>Утегенов А.У., Тажен А.Б., Райымханов Ж., Камбаров А.А.</i> Тепловая эрозия графитовой мишени под воздействием интенсивного импульсного плазменного потока .....	33

<b>3-бөлім</b>	<b>Раздел 3</b>
<b>Конденсирленген күй физикасы және материалтану проблемалары. Наноғылым</b>	<b>Физика конденсированного состояния и проблемы материаловедения. Нанонаука</b>

<i>Kenzhina I., Kozlovskiy A., Kadyrzhanov K.K.</i> Study of structural properties of copper nanotubes modified with ionizing radiation.....	42
<i>Жантуаров С.Р., Жолдыбаев К.С., Алдияров А.У., Мухамедишина Д.М.</i> Моделирование перовскитных солнечных элементов.....	49
<i>Сламия М., Жұмадилов Р., Досболаев М.Қ., Ертаев О.А., Рамазанов Т.С., Токмолдин Н.С., Карни М.Дж.</i> Модификацияланған магнетрондық тозандандыру әдісімен мыс нанобөлшектерін өсіру .....	57
<i>Сәрсембек С.С., Мұсабек Г.К., Диханбаев К.К., Ермұхамед Д., Байғанатова Ш.Б., Амирханова Г.А.</i> Кеуекті галлий фосфиді қабықшаларын алу және физикалық қасиеттерін зерттеу .....	64
<i>Zhanturina N., Aimagambetova Z., Sagimbaeva Sh.</i> About the origin of the emission bands in the wavelength range 320-600 nm in KBr crystal at low temperatures .....	77
<i>Насурлла Маулен, Буртебаев Н., Мукашев К.М., Насурлла Маржан, Ходжаев Р.А.</i> Температурная зависимость энергетического разрешения детектора из арсенида галлия .....	85
<i>Нусупов К.Х., Бейсенханов Н.Б., Бакранова Д.И., Кейінбай С., Сейтов Б.Ж.</i> Структура пленок карбида кремния, синтезированных методом магнетронного распыления.....	93
<i>Михайлов Л.В., Ерсайн Р.Ж., Михайлова С.Л., Исмаилова Г.А., Соколов А.С.</i> Моделирование процесса улавливания пыли оконным очистителем воздуха.....	100
<i>Чучвага Н.А., Кислякова Н.М., Аймаганбетов К.П., Рақыметов Б.А., Токмолдин Н.С.</i> Исследование влияния влажной химической обработки на поверхность кремниевых монокристаллических пластин .....	108

---

## CONTENTS

### Section 1 Theoretical Physics. Nuclear and Elementary Particle Physics. Astrophysics

<i>Dyachkov V.V., Zaripova Yu.A., Yushkov A.V., Shakirov A.L., Bigeldiyeva M.T., Dyussebayeva K.S., Abramov K.E.</i> Study of distribution of beta-pollution in the city of Almaty.....	4
<i>Bekbaev A.K., Aznabayev D.T., Korobov V.I., and Kemelzhanova S.E.</i> Determination of the non-relativistic energy spectrum of molecular hydrogen ions $H_2^+$ and $HD^+$ .....	11

### Section 2 Plasma Physics

<i>Arkhipov Yu.V., Askaruly A., Ashikbayeva A.B., Davletov A.E., Dubovtsev D.Y., Santybayev Kh., Tkachenko I.M.</i> Analysis of methods for calculating the static characteristics of dense Coulomb systems .....	20
<i>Utegenov A.U., Tazhen A.B., Rayymkhanov Zh., Kambarov A.A.</i> Heat erosion of the graphite target under effects of intensive pulse plasma flow.....	33

### Section 3 Condensed Matter Physics and Materials Science Problems. Nanoscience

<i>Kenzhina I., Kozlovskiy A., Kadyrzhanov K.K.</i> Study of structural properties of copper nanotubes modified with ionizing radiation.....	42
<i>Zhantuarov S.R., Zholdybaev K.S., Aldiyarov A.U., Muchamedshina D.M., Tokmoldin N.S., Carnie M.J.</i> Modeling of perovskite solar cells .....	49
<i>Slamia M., Zhumadilov R., Dosbolayev M.K., Yertayev O.A., Ramazanov T.S.</i> Growth of copper nanoparticles by modified magnetron sputtering .....	57
<i>Sarsembek S.S., Mussabek G.K., Dikhanbaev K.K., Ermukhamed D., Baiganatova Sh.B., Amirkhanova G.A.</i> The production of porous gallium phosphide films and the investigation of physical properties .....	64
<i>Zhanturina N., Aimaganbetova Z., Sagimbaeva Sh.</i> About the origin of the emission bands in the wavelength range 320-600 nm in KBr crystal at low temperatures .....	77
<i>Nassurlla Maulen, Burtebayev N., Mukhashev K.M., Nassurlla Marzhan and Khojayev R.A.</i> Temperature dependence of the energy resolution of a gallium arsenide detector .....	85
<i>Nussupov K.Kh., Beisenkhanov N.B., Bakranova D.I., Keyinbay S., Seitov B.Zh.</i> The structure of silicon carbide films synthesized by magnetron sputtering .....	93
<i>Mikhailov L.V., Yersayn R.Zh., Mikhailova S.L., Ismailova G. A., Sokolov A. S.</i> Modeling of the collating dust process by a window air cleaner.....	100
<i>Chuchvaga N.A., Kislyakova N.M., Aimaganbetov K.P., Rakymetov B.A., Tokmoldin N.S.</i> A study of the effects of wet chemical treatment on the surface of monocrystalline silicon wafers.....	108