



UNIVERSITATEA DE STAT "ALECU RUSSO"

ISSN 1857-0437

FIZICĂ ȘI TEHNICĂ: **procese, modele, experimente**

Revistă științifică a profilului de cercetare
"Proprietățile fizice ale substanțelor în diverse stări"

2
2006

Bălți

Fondatorul: Universitatea de Stat "Alec Russo"

Colegiul de redacție: Nicolae Filip, *Academician al Academiei Internaționale a Școlii Superioare, Universitatea „Alec Russo”, Moldova (redactor-șef)*
Dumitru Ghițu, *Academician al A.Ș. din Moldova*
Petru Stoicev, *conf. dr. hab., Universitatea Tehnică, Moldova*
Gheorghe Popa, *prof. dr., Universitatea "Al.I.Cuza", România*
Valeriu Ureadov, *dr. hab., Institutul de Radiofizică, Nijnii Novgorod, Rusia*
Eugen Plohotniuc, *conf. dr., Universitatea „Alec Russo”, Moldova*
Virgil Cheptea, *conf. dr., Universitatea „Alec Russo”, Moldova*
Alexandru Balanici, *conf. dr., Universitatea „Alec Russo”, Moldova (secretar științific)*

Tehnoredactare: Eugeniu Cabac, *magistru*

Design și aspectul paginii de titlu: Ghenadie Cabac, *asist. univ.*

Redactori: Ala Sainenco, *conf. dr.*
Elena Sirota, *conf. dr.*
Lara Aladin, *lect. sup.*

Recenzenți: Mihai Caraman, *prof., dr. hab., Universitatea de Stat din Moldova*
Petru Stoicev, *conf., dr. hab., Universitatea Tehnică, Moldova*
Eugeniu Gheorghică, *prof., dr. hab., Universitatea de Stat din Tiraspol, Moldova*
Veaceslav Ursachi, *prof., dr. hab., Universitatea Tehnică, Moldova*
Valeriu Gușan, *conf., dr., Universitatea de Stat "Alec Russo", Moldova*
Florentin Paladi, *conf., dr., Universitatea de Stat din Moldova*
Mihail Rusanovschi, *conf., dr., Universitatea Tehnică, Moldova*

Adresa redacției: Universitatea de Stat "Alec Russo",
str. Pușchin 38, 3100, Bălți, Republica Moldova
Tel.: (231)24561, fax: (231)33039
E-mail: tfmi@usb.md

Tiparul: Tipografia Universității de Stat "Alec Russo"

© Universitatea de Stat „Alec Russo”,
Presa universitară bălțeană, 2006

ISSN 1857-0437

CUPRINS

<i>Vitalie Ursu</i> Calculul temperaturii critice în teoria bizonală a supraconductibilității în afara teoremei Migdal	5
<i>Viorel Ciornea, Profir Bardețchi, Mihai Macovei</i> Frînarea emisie spontane colective prin intermediul efectelor de interferență cuantică	11
<i>Virgil Cheptea, Alexandru Marușcenco</i> Utilizarea calculatorului la rezolvarea unor probleme din fizica corpului solid	19
<i>Efim Aramă, Sergiu Bajura</i> Obținerea și analiza structurală a compușilor stratificați $Zn_xIn_2S_{3+x}$	30
<i>Efim Aramă</i> Spectrele vibraționale în infraroșu ale rețelei cristaline a compușilor semiconductori $Zn_xIn_2S_{3+x}$	36
<i>Andrian Gheorghță, Igor Postolachi, Mihai Caraman</i> Efecte optice în bicristalele aliajelor $Bi_{1-x}Sb_x$ ($0,06 \leq x \leq 0,20$)	44
<i>Mihail Popa, Gheorghe Ioan Rusu</i> Transmisia optică în straturile subțiri de ZnSe	52
<i>Mihail Popa, Gheorghe Ioan Rusu</i> Determinarea indicelui de refracție a straturilor subțiri de ZnSe prin metoda SWANEPOEL	58
<i>Ion Olaru, Valeriu Guțan</i> Dependența parametrilor energetici ai laserului compact cu excimer XeCl de componența mediului activ	65
<i>Pavel Pereteatcu, Boris Ursan</i> Tensiuni remanente în structurile superficiale formate la aliere prin metoda electroeroziunii în câmp magnetic	71
<i>Шарагов Василий</i> Принципы разработки технологии терромагнитной обработки промышленных стеклоизделий	74
Exigențe privind prezentarea lucrărilor științifice pentru revista „Fizică și tehnică: Procese, modele, experimente”	80

CONTENTS

<i>Vitalie Ursu</i> The computation of the critical temperature in the two-band theory of supraconductivity apart from the Migdal theorem	5
<i>Viorel Ciornea, Profir Bardețchi, Mihai Macovei</i> Slowing of the collective spontaneous emission due to quantum interference effects	11
<i>Virgil Cheptea, Alexandru Marușcenco</i> The use of the computer in solving some problems dealing with the physics of solid objects	19
<i>Efim Aramă, Sergiu Bajura</i> The obtaining and structural analysis of the film compounds $Zn_xIn_2S_{3+x}$	30
<i>Efim Aramă</i> The vibrational infrared spectra of crystalline structure of semiconductor compounds $Zn_xIn_2S_{3+x}$	36
<i>Andrian Gheorghță, Igor Postolachi, Mihai Caraman</i> Optic effects in the bicrystals of $Bi_{1-x}Sb_x$ ($0,06 \leq x \leq 0,20$) alloys	44
<i>Mihail Popa, Gheorghe Ioan Rusu</i> Optical transmission in ZnSe thin films	52
<i>Mihail Popa, Gheorghe Ioan Rusu</i> The determination of the index of refraction of thin films by Swanepoel method	58
<i>Ion Olaru, Valeriu Guțan</i> The dependence of the energetic parameters of the compact laser with excimer XeCl on the composition of the active medium	65
<i>Pavel Pereteatcu, Boris Ursan</i> Residual pressures in superficial structures created by alloying with electric sparks in a magnetic field	71
<i>Шарапов Василий</i> The principles of design of technology thermomagnetic treatment of industrial glassware	74
Requirements for the presentation of scientific papers for the journal „ <i>Physics and Technics: Processes, models, experiments</i> ”	80

C.Z.U. 537.312.62.01

CALCULUL TEMPERATURII CRITICE ÎN TEORIA BIZONALĂ A SUPRACONDUCTIBILITĂȚII ÎN AFARA TEOREMEI MIGDAL

Vitalie Ursu

(Institutul de Fizică aplicată)

Este obținută expresia analitică pentru temperatura T_c de tranziție în starea supraconductoare, deosebită de cazul sistemelor obișnuite bizonale prin renormarea mărimilor din ea, datorită efectelor neadiabactice și a corelațiilor electronice puternice. Este cercetată dependența valorii T_c de parametrul Migdal $m = w_0/e_F$. Se demonstrează că evidența suprapunerii benzilor energetice pe suprafața Fermi și a efectelor neadiabactice în cazul valorilor mici ale impulsului transmis ($q \ll 2p_F$) permite obținerea unor valori mari ale temperaturii T_c chiar și în cazul interacțiunii slabe electron-fonon.

Introducere

Materialele cu temperaturi înalte de tranziție în stare supraconductoare, descoperite în ultimii ani [1], posedă o serie de particularități însemnate: anizotropie puternică a proprietăților cristaline, structură stratificată, corelații electronice și interacțiuni electron-fonon puternice, simetrie înaltă în spațiul impulsurilor, suprapunerea benzilor energetice la suprafața Fermi, valori mici ale energiei Fermi etc. Aceste particularități complică evidențierea mecanismului supraconductibilității la temperaturi înalte.

Problema evidențierii și elaborării teoriei supraconductibilității în sisteme neadiabate bizonale, pe calea depășirii limitei teoremei Migdal, este studiată de mai mulți autori [2]. Din aceste cercetări rezultă că funcțiile vertex în cazul $e_F \sim w_0$, unde e_F reprezintă energia Fermi și w_0 – frecvența Debaye, devin negative și nu duc la valori mari ale temperaturii T_c de tranziție în faza supraconductoare. În cazul când impulsul transmis q la interacțiunea electron-fonon este mic în comparație cu impulsul Fermi p_F ($q \ll 2p_F$), se obțin valori esențiale pentru T_c . Situația dată e posibilă, în particular, în sistemele cu corelații electronice puternice [3], [4]. Suprapunerea benzilor energetice la suprafața Fermi conduce la apariția a două salturi energetice care influențează esențial asupra supraconductibilității.

În ultimii ani se efectuează cercetări în căutarea unor noi materiale supraconductibile. Un interes deosebit prezintă compusul MgB_2 , care are temperatura de trecere la supraconductibilitate de circa $T_C \sim 40K$. Această substanță are un șir de anomalii a proprietăților fizice legate de anizotropia sistemului [9], în particular, prezența suprapunerii benzilor energetice pe suprafața Fermi. În anumite condiții pot apărea efecte neadiabactice, deoarece pentru compusul MgB_2 parametrul Migdal $m = w_0/e_F \approx 0,1$.

În lucrarea dată sînt prezentate ecuația și soluția ei pentru temperatura de tranziție T_c în faza supraconductoare cu evidența rolului neadiabaticității și al

corelațiilor electronice puternice în materialele cu temperatură înaltă de tranziție în faza conductoare. La fel sînt efectuate calculele corespunzătoare numerice, analiza lor, precum și calculul coeficientului izotopic α [8].

1. Temperatura critică T_c de tranziție în faza supraconductoare

Pornind de la hamiltonianul sistemului în considerația interacțiunilor electron-fonon și aplicînd metoda diagramelor din teoria perturbațiilor, se obține mai întîi sistemul de ecuații Green.

Constantele interacțiunilor electron-fonon, renormate corespunzător valorilor sale, se prezintă în forma:

$$\begin{aligned} \tilde{I}_{11} &= N_1 \tilde{V}_{11}(0, w_0) = I_{11} + I_{11}^2 \left[2P_{V1}(Q_c, w_0) + P_{C1}(Q_c, w_0) \right], \\ \tilde{I}_{12} &= V_{12} N_2, \quad \tilde{I}_{nn}^z = I_{nn} [1 + I_{nn} P_{Vn}(Q_c, w_0)] \end{aligned} \quad (1)$$

unde P_{Vn} și P_{Cn} sînt funcții vertexe pentru zona a n -a [5], N_n – densitatea stărilor a cavității n pe suprafața Fermi, iar V_{nm} – volumul celulei elementare a rețelei cristaline. Constantele intersecțiunii electron-fonon I_{nm} corespund interacțiunilor de tipul 11 (între particulele primei zone); 12 (între particulele din prima și a doua zonă) etc.

Expresiile pentru operatorii de masă $M_m(W)$ și $S_m(W)$ (diagonali și nediagonali), unde W reprezintă frecvența electronică Matsubara, în funcțiile lui Green, care, în reprezentarea nkW , sînt formulate ținîndu-se cont de diagramele cu intersecția a două linii de interacțiune electron-fonon (ieșire în afara teoremei Migdal), au forma:

$$M_m(\Omega) = \tilde{I}_{mm}^z \frac{1}{bN_m} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) G_m(\mathbf{p}_1, \Omega_1) - \frac{I_{mn}}{bN_n} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) G_n(\mathbf{p}_1, \Omega_1), \quad (2)$$

$$\Sigma_1(\Omega) = -\frac{\lambda_{11}^0}{\beta N_1} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) F_1(\mathbf{p}_1, \Omega_1) - \frac{\lambda_{12}}{\beta N_2} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) F_2(\mathbf{p}_1, \Omega_1), \quad (3)$$

$$\Sigma_2(\Omega) = -\frac{\lambda_{22}^0}{\beta N_2} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) F_2(\mathbf{p}_1, \Omega_1) - \frac{\lambda_{21}}{\beta N_1} \sum_{\mathbf{p}_1} \sum_{\Omega_1} D(\Omega, \Omega_1) F_1(\mathbf{p}_1, \Omega_1).$$

unde $b = T^{-1}$, $D(W, W_1)$ – funcția Green pentru fononi, G_m și F_m – funcțiile totale Green pentru starea supraconductibilă. Introducem definiția $\Sigma_n(\Omega) = Z_n(\Omega) \Delta_n(\Omega)$. Substituind în expresiile pentru funcțiile Green, în aproximația liniară, în raport cu Δ_n la limita $T \sim T_c$ și efectuînd integrarea în raport cu energia, corespunzător cu (3), obținem:

$$\begin{aligned}
 \Sigma_1(\Omega) &= -\frac{\lambda_{11}^0}{Z_1} \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_1} \frac{\omega_0^2}{(\Omega - \Omega_1)^2 + \omega_0^2} \frac{\Delta_1(\Omega_1)}{|\Omega_1|} \varphi_1(\Omega_1) + \\
 &+ \frac{\lambda_{12}}{Z_1} \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_1} \frac{\omega_0^2}{(\Omega - \Omega_1)^2 + \omega_0^2} \frac{\Delta_2(\Omega_1)}{|\Omega_1|} \varphi_2(\Omega_1), \\
 \Sigma_2(\Omega) &= -\frac{\lambda_{22}^0}{Z_2} \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_1} \frac{\omega_0^2}{(\Omega - \Omega_1)^2 + \omega_0^2} \frac{\Delta_2(\Omega_1)}{|\Omega_1|} \varphi_2(\Omega_1) + \\
 &+ \frac{\lambda_{21}}{Z_2} \frac{1}{\beta} \sum_{\Omega_1} \frac{\omega_0^2}{(\Omega - \Omega_1)^2 + \omega_0^2} \frac{\Delta_1(\Omega_1)}{|\Omega_1|} \varphi_1(\Omega_1),
 \end{aligned} \tag{4}$$

unde

$$\begin{aligned}
 j_n(\Omega_1) &= \operatorname{arctg} \frac{W_n - m_n}{Z_n(\Omega_1)} + \operatorname{arctg} \frac{m_n}{Z_n(\Omega_1)}, \\
 Z_n &= Z_n(0) = 1 - \lim_{\Omega \rightarrow 0} \frac{1}{\Omega} \operatorname{Im} M_n(\Omega) = 1 + I_{nm}^z \frac{1}{2} \left[\frac{W_n - m_n}{W_n - m_n + w_0} + \frac{m_n}{m_n + w_0} \right] + \\
 &+ I_{nm} \frac{1}{2} \left[\frac{W_n - m_n}{W_n - m_n + w_0} + \frac{m_n}{m_n + w_0} \right], \quad \tilde{m}_n = m_n - \operatorname{Re} M_n(0), \quad (m \neq n).
 \end{aligned} \tag{5}$$

unde W_n reprezintă energia zonei n , m_n – potențialul chimic corespunzător zonei n .

Temperatura de tranziție în starea supraconductoare se determină în rezultatul rezolvării sistemului de ecuații:

$$\Delta_1 = \frac{\tilde{I}_{11}}{Z_1} \Delta_1 \Phi_1(T_c) + \frac{I_{12}}{Z_1} \Delta_2 \Phi_2(T_c), \quad \Delta_1 = \frac{I_{21}}{Z_2} \Delta_1 \Phi_1(T_c) + \frac{\tilde{I}_{22}}{Z_2} \Delta_2 \Phi_2(T_c). \tag{6}$$

unde $\Phi_n(T_c)$ reprezintă funcția de temperatură critică.

Considerînd determinantul acestui sistem de ecuații egal cu zero, obținem:

$$(\bar{I}_{11} \bar{I}_{22} - \bar{I}_{12} \bar{I}_{21}) \Phi_1(T_c) \Phi_2(T_c) - \bar{I}_{11} \Phi_1(T_c) - \bar{I}_{22} \Phi_2(T_c) + 1 = 0, \tag{7}$$

unde $\bar{I}_{11} = \tilde{I}_{11}/Z_1$; $\bar{I}_{22} = \tilde{I}_{22}/Z_2$; $\bar{I}_{12} = I_{12}/Z_1$; $\bar{I}_{21} = I_{21}/Z_2$.

Funcția $\Phi_n(T_c)$ se reduce la forma:

$$\begin{aligned}
 \Phi_n(T_c) &= pT_c \sum_{\Omega_1} \frac{w_0^2}{\Omega_1^2 + w_0^2} \frac{1}{|\Omega_1|} - T_c \sum_{\Omega_1} \frac{w_0^2}{\Omega_1^2 + w_0^2} \frac{1}{|\Omega_1|} \left[\operatorname{arctg} \frac{|\Omega_1|}{W_n - \bar{m}_n} + \operatorname{arctg} \frac{|\Omega_1|}{\bar{m}_n} \right] - \\
 &- T_c \sum_{\Omega_1} \frac{w_0^2 |\Omega_1|}{(\Omega_1^2 + w_0^2)^2} j_n(\Omega_1).
 \end{aligned} \tag{8}$$

unde $m_n = m - z_n$ (z_n reprezintă nivelul energetic de jos a zonei n).

Primul termen al acestei expresii conține singularitate logaritmică în raport cu mărimea T_c și în aproximația legăturii slabe ($T_c/w_0 \ll 1$) devine egal cu:

$$pT_c \sum_{\Omega_1} \frac{w_0^2}{\Omega_1^2 + w_0^2} \frac{1}{|\Omega_1|} \approx \ln \frac{2w_0 g}{pT_c}. \tag{9}$$

În aceeași aproximație, în restul termenilor, integrarea în raport cu frecvența poate fi executată în limitele de la minus la plus infinit (analog cu cazul $T = 0$). Pentru $\Phi_n(T_c)$ obținem:

$$\Phi_n(T_c) = x_c + f_n, \quad x_c = \ln \frac{2w_0g}{pT_c}, \quad (10)$$

$$f_n = -\frac{1}{2} \left[\ln(1+m_n) + \ln(1+m'_n) - \frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left(\frac{m_n}{1+m_n} + \frac{m'_n}{1+m'_n} \right) \right], \quad (11)$$

$$m_n = \frac{w_0}{\bar{W}_n - \bar{m}_n}, \quad m'_n = \frac{w_0}{\bar{m}_n}, \quad \bar{W}_n = \frac{W_n}{Z_n}, \quad \bar{m}_n = \frac{m_n}{Z_n}.$$

Substituind expresia (10) în ecuația (7), obținem:

$$\bar{a}x_c^2 - \bar{b}x_c + \bar{c} = 0, \quad (12)$$

unde

$$\begin{aligned} \bar{a} &= \bar{I}_{11}\bar{I}_{22} - \bar{I}_{12}\bar{I}_{21}; & \bar{b} &= \bar{I}_{11} + \bar{I}_{22} - \bar{a}(f_1 + f_2), \\ \bar{c} &= 1 - \bar{I}_{11}f_1 - \bar{I}_{22}f_2 + \bar{a}f_1f_2. \end{aligned} \quad (13)$$

La fel putem scrie:

$$T_c = \frac{2w_0g}{p} e^{-x_c}, \quad x_c = \frac{\bar{b} \pm \sqrt{\bar{b}^2 - 4\bar{a}\bar{c}}}{2\bar{a}}. \quad (14)$$

Formal expresia (14) coincide cu expresia corespunzătoare din cazul supraconductorului bizonal obișnuit [6]. Însă mărimile din ea sînt renormate și conțin contribuții suplimentare determinate de neadiabaticitatea sistemului.

2. Rezultatele calculelor numerice

Calculul numeric, efectuat conform expresiilor de mai sus (14), se simplifică pentru cazul particular cînd parametrul Migdal egal cu $m = m_1 = m_2$ ($m_n = \frac{2\omega_0}{W_n}$), iar

populația zonelor energetice $\mu_n = \frac{W_n}{2}$. În cazul sistemelor cercetate (cînd impulsul transmis la interacțiunea electron-fonon este mic ($q \ll 2p_F$)) parametrii teoriei sînt egali cu cei ai sistemelor reale ce posedă aceleași proprietăți [7]. Alegem parametrii astfel:

$$\lambda_{11} = 0,5; \quad \lambda_{22} = 0,3; \quad \lambda_{12} = 0,1; \quad \lambda_{21} = 0,05.$$

Valorile renormate ale parametrilor $\bar{\lambda}_{nm}$ în cazul $Q_c = 0,1$ și $Q_c = 0,9$, unde Q_c reprezintă frecvența critică Matsubara, se capătă în baza relațiilor (7), (1) și (5) sînt indicate în tabelele 1 și 2.

Dependența raportului T_c/w_0 de valorile parametrului Migdal m este indicată în figură. Comparînd curbele din figură, observăm că efectele neadiabaticității sistemului și corelațiile electronice puternice măresc esențial temperatura de tranziție în faza supraconductoare în cazul $Q_c \ll 1$.

Tabelul 1.

Valorile renormate ale parametrilor $\bar{\lambda}_{nm}$ în cazul $Q_c = 0,1$

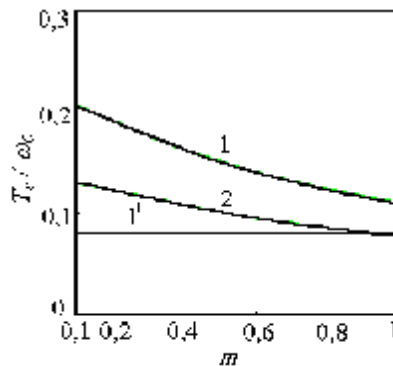
\bar{m}	P_{V_i}	P_{C_i}	$\bar{\lambda}_{11}$	$\bar{\lambda}_{22}$	$\bar{\lambda}_{12}$	$\bar{\lambda}_{21}$
0	0	0	0,312	0,240	0,065	0,038
0,1	0,679	0,656	0,590	0,350	0,058	0,036
0,3	0,565	0,553	0,584	0,344	0,064	0,038
0,6	0,426	0,425	0,568	0,333	0,069	0,040
0,9	0,342	0,342	0,556	0,320	0,073	0,042

Tabelul 2.

Valorile renormate ale parametrilor $\bar{\lambda}_{nm}$ în cazul $Q_c = 0,9$

\bar{m}	P_{V_i}	P_{C_i}	$\bar{\lambda}_{11}$	$\bar{\lambda}_{22}$	$\bar{\lambda}_{12}$	$\bar{\lambda}_{21}$
0	0	0	0,312	0,240	0,065	0,038
0,1	-0,053	-0,044	0,315	0,223	0,065	0,038
0,3	-0,012	-0,0096	0,322	0,227	0,068	0,039
0,6	-0,008	-0,112	0,339	0,236	0,073	0,041
0,9	-0,005	-0,113	0,360	0,245	0,076	0,042

Mai mult ca atât, valoarea maximă a acestei mărimi se atinge în domeniul valorilor mici ale parametrului m ($m \sim 0,1$). În cazul $Q_c \sim 1$ se observă micșorarea valorii T_c și dependența slabă a ei de m . Din materialele cu valori mici m ($m \sim 0,1$) face parte și supraconductorul bi-bandă MgB_2 . Prezența corelațiilor puternice ale electronilor sau particularitățile în spectrul energetic al electronilor în asemenea tipuri de sisteme poate stimula amplificarea influenței efectelor neadiabaticității asupra supraconductibilității.



Dependența temperaturii T_c de parametrul Migdal m . Curbele 1 și 1' corespund cazului sistemului neadiabatic pentru $Q_c = 0,1$ și $Q_c = 0,9$, corespunzător. Curba 2 - cazului sistemului adiabatic.

Bibliografie

1. Bernorz, J.G., Muller, K.A., *Supraleitfähigkeit in nonadiabtic systems*, *Zhuornal Physiksc*, 1986, B 64, p.189-197.

2. Danilenko, O.V., Dolgov, O.V., *Nonadiabatic contribution to the quasiparticle self-energy in systems with strong electron-phonon interaction* // arXiv, [http: xxx.lanl.gov/](http://xxx.lanl.gov/), 2000, preprint cond-mat 0007189, 20 p..
3. Kubic, M.L., Zeyher, R., *Anisotropic impurities in superconductors*, Physical Review, 1994, B 49, p. 4395 – 4404.
4. Zeyher, R., Kubic, M.L., *Statics and dynamics of charge fluctuations in the J model*, Physical Review, 1996, B 53, p. 2850 - 2863.
5. Pietronero L., Strassler S., Grimaldi C., *All substitution in crystals and influence on superconducting and structural properties*, Physical Review, 1995, B 52, p.10516 – 10523.
6. В.А. Москаленко, *Двухзонная теория сверхпроводников на основании уравнений Гинзбурга-Ландау*, Физика Металлов и Металловедение, 1959, т. 8, с.503-517.
7. Golubov, A.A., Kortus, J. at al., *Multiband model for penetration depth in MgB₂*, Journal of Physics: Condensed Matter, 2002, N. 14, p.1353-1365.
8. Palistrant, M.E., Ursu, V.A., *Superconductivity in two-band nonadiabatic systems* // arXiv, [http: xxx.lanl.gov/](http://xxx.lanl.gov/), 2006, preprint cond-mat 0602551, 17 p.
9. Alexandrov, A.S., Breakdown of the Migdal – Eliashberg theory in the strong – coupling adiabatic regime, // <http://www.lanl.gov/>

THE COMPUTATION OF THE CRITICAL TEMPERATURE IN THE TWO-BAND THEORY OF SUPRACONDUCTIVITY APART FROM THE MIGDAL THEOREM

Vitalie Ursu

(Institute of Applied Physics)

The analytic expression for the temperature T_c of transition in the superconductivity state differs from simple two-band systems by renormalizing dimensions, that are inside, thanks to nonadiabatical effects and to strong electronic correlations. The dependence of the T_c from the parameter Migdal $m=w_0/e_F$ has been investigated. It has been demonstrated that the presence of overlapping of energy bands of the surface Fermi and of nonadiabatical effects in the case of small values of the transmitted impulse ($q < 2p_F$) gives the possibility to get high values of the T_c , even in the case of small electron-phonon interactions.

Prezentat la redacție la 18.11.06

C.Z.U.: 535.34 621.373:535

FRÎNAREA EMISIEI SPONTANE COLECTIVE PRIN INTERMEDIUL EFECTELOR DE INTERFERENȚĂ CUANTICĂ

Viorel Ciornea (Institutul de Fizică Aplicată)

Profir Bardețchi, Mihai Macovei (Universitatea Tehnică a Moldovei)

Autorii cercetează emisia spontană colectivă a unui sistem atomic format din două particule spațial separate. Se demonstrează ca efectele de interferență cuantică ce apar între diferite canale de emisie spontană și interacțiunea colectivă între radiatori provoacă o frînare considerabilă a acestei radiații.

Introducere

Emisia spontană colectivă a radiației unui grup de atomi cu două sau trei niveluri este studiată intens în optica cuantică de mai bine de jumătate de secol [1-10]. Aceste studii sînt importante prin posibilitățile de manipulare și dirijare a emisiei spontane (problemă extrem de importantă în domeniul radiației gama, care poate fi o alternativă creării laserelor cu lungimi de undă din domeniul gama [11]).

Este bine cunoscut faptul că emisia spontană de la un emițător excitat este foarte sensibilă la modificările mediului ce înconjoară acest emițător. Plasînd un radiator excitat în interiorul unei cavități, vom putea dirija emisia spontană a acestuia: în cazul cînd tranziția atomică se află în rezonanță cu un mod al cavității, emisia spontană va crește, iar în cazurile de ne-rezonanță aceasta va scade [12-14]. Emisiile spontane ne-exponențiale au loc atunci cînd atomul excitat este amplasat într-un cristal fonic [15]. Un astfel de comportament al atomului în cavități sau cristale fonice poate fi explicat prin faptul că în apropierea frecvenței de tranziție rata dezintegrării spontane este proporțională cu densitatea modală a cîmpului electromagnetic.

În cazul în care subsistemul atomic interacționează cu vidul comprimat de bandă largă multimod, apar o serie întregă de efecte ce nu pot fi observate în cazul interacțiunii cu vidul normal [16].

De asemenea și interferența cuantică aduce noi surprize. Spre exemplu, într-un sistem atomic cu multe niveluri interferența cuantică poate duce la apariția mai multor efecte neașteptate, cum ar fi reducerea emisiei spontane sau chiar dispariția acesteia [17, 18].

În prezenta lucrare s-a studiat emisia spontană colectivă a radiației de către o pereche de radiatori cu trei niveluri de tipul Λ excitați care se află la distanța r_{ab} unul față de altul. S-a analizat influența efectelor de interferență și de separare spațială a atomilor asupra dinamicii cuantice colective. S-a arătat că emisia spontană colectivă poate fi încetinită datorită efectelor colective. De asemenea, s-au obținut soluțiile exacte pentru operatorii atomici în diverse condiții.

Menționăm că emisia spontană a unei perechi de atomi cu două niveluri, identici și fixați, ce formează, inițial, o singură excitare a fost studiată intens [19, 20].

În lucrare s-a obținut ecuația pentru matricea densității pentru radiatorii cu trei niveluri de tipul Λ , ținându-se cont de separarea spațială a lor utilizând metodele de excludere a operatorilor câmpului electromagnetic [5, 21]. Apoi, cu ajutorul acestei ecuații s-a analizat dinamica cuantică a unei perechi de emițători cu trei niveluri. Articolul se încheie cu concluzii și analiza rezultatelor.

II. Dinamica cuantică a unui sistem atomic excitat de tipul Λ

Să considerăm un set de N radiatori identici cu trei niveluri energetice de tipul Λ . Presupunem că funcțiile de undă ale radiatorilor nu se suprapun. În aproximația dipolară, Hamiltonianul care descrie un asemenea mediu atomic poate fi reprezentat în felul următor:

$$H = \sum_k \mathbf{h}\omega_k a_k^+ a_k + \sum_{j=1}^N \sum_{\alpha=1}^3 \mathbf{h}\omega_{\alpha} S_{\alpha\alpha}^{(j)} + i \sum_k \sum_{j=1}^N (\mathbf{g}'_k \cdot \mathbf{d}_{31}) \{ a_k^+ S_{13}^{(j)} e^{-ik \cdot \mathbf{r}_j} - a_k S_{31}^{(j)} e^{ik \cdot \mathbf{r}_j} \} +$$

$$+ i \sum_k \sum_{j=1}^N (\mathbf{g}'_k \cdot \mathbf{d}_{32}) \{ a_k^+ S_{23}^{(j)} e^{-ik \cdot \mathbf{r}_j} - a_k S_{32}^{(j)} e^{ik \cdot \mathbf{r}_j} \}, \quad (1)$$

unde: $\mathbf{h}\omega_{\alpha}$ reprezintă energia nivelului α ; $\mathbf{d}_{\beta\alpha}$ - momentul dipolar al tranziției dintre stările $|3\rangle$ și $|\beta\rangle$ ($\beta=1, 2$); a_k^+ (a_k) - operatorul de generare (anihilare) pentru fotonii cu impulsul $\mathbf{h}\mathbf{k}$; $\mathbf{h}\omega_k$ - energia și λ ($\lambda=1, 2$) - polarizarea; $\mathbf{g}'_k = \sqrt{\frac{2\pi\mathbf{h}\omega_k}{V}} \mathbf{e}_{\lambda}$, \mathbf{e}_{λ} reprezintă vectorul polarizării fotonului și V este volumul de cuantificare a câmpului electromagnetic; $S_{\alpha\beta}^{(j)}$ reprezintă operatorul ce corespunde tranziției dintre stările $|\beta\rangle$ și $|\alpha\rangle$ pentru radiatorul j și satisface relației de comutare:

$$[S_{\alpha\beta}^{(j)}, S_{\alpha'\beta'}^{(l)}] = \delta_{jl} [\delta_{\beta\beta'} S_{\alpha\alpha'}^{(j)} - \delta_{\alpha\alpha'} S_{\beta\beta'}^{(j)}].$$

În reprezentarea Heisenberg putem obține ecuația mișcării unui operator atomic colectiv arbitrar $O(t)$:

$$\frac{d}{dt} \langle O(t) \rangle = i \sum_{j=1}^N \sum_{a=1}^3 w_a \langle [S_{aa}^{(j)}, O(t)] \rangle - \sum_k \sum_{j=1}^N \frac{(\mathbf{g}'_k \cdot \mathbf{d}_{31})}{\mathbf{h}} \{ \langle a_k^+ [S_{13}^{(j)}, O(t)] \rangle e^{-ik \cdot \mathbf{r}_j} + h.c. \} -$$

$$- \sum_k \sum_{j=1}^N \frac{(\mathbf{g}'_k \cdot \mathbf{d}_{32})}{\mathbf{h}} \{ \langle a_k^+ [S_{23}^{(j)}, O(t)] \rangle e^{-ik \cdot \mathbf{r}_j} + h.c. \}.$$

Aici, prin valoarea medie $\langle \dots \rangle$ înțelegem medierea după starea inițială a sistemului „atom plus câmp”.

Se poate observa că ecuația (2) conține operatori ai câmpului electromagnetic. Considerînd că subsistemul atomic interacționează slab cu modurile câmpului electromagnetic extern, eliminăm acești operatori, soluționînd formal ecuația Heisenberg pentru operatorii de câmp. Vom reprezenta soluțiile acestora în forma:

$$a_k^+(t) = a_k^{v+}(t) + a_k^{s+}(t), \quad (3)$$

unde

$$a_k^{v+}(t) = a_k^+(0)e^{i\omega_k t},$$

$$a_k^{s+}(t) = \sum_{j=1}^N I \left(\frac{\mathbf{g}'_k \cdot \mathbf{d}_{31}}{\mathbf{h}} \right) S_{31}^{(j)}(t) \zeta(\omega_k - \omega_{31}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j} + \left(\frac{\mathbf{g}'_k \cdot \mathbf{d}_{32}}{\mathbf{h}} \right) S_{32}^{(j)}(t) \zeta(\omega_k - \omega_{32}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_j},$$

sunt respectiv părțile liberă și de sursă ale operatorilor câmpului electromagnetic. Aici

$$\zeta(\omega_k - \omega_{31}) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau e^{i(\omega_k - \omega_{31})\tau} = \pi \delta(\omega_k - \omega_{31}) + P \frac{i}{\omega_k - \omega_{31}}$$

și $a = [a^+]^+$.

Pentru a reprezenta operatorii de câmp într-un asemenea mod, este necesar de a impune restricția astfel încît timpul necesar semnalului luminos pentru a parcurge mostra atomică să fie mic în comparație cu timpul Δt în care nivelurile energetice suportă schimbări esențiale, adică $(r_{ij})_{\max} \ll c\Delta t = L_0$, adică timpul de zbor al fotonilor prin mostra atomică trebuie să fie mai mic decît timpul de relaxare a sistemului (aproximația Born-Markov). De exemplu, pentru timpul de viață $3.3 \cdot 10^{-8} s$ obținem $L_0 = 10^3 cm$, ceea ce înseamnă că această condiție nu reprezintă o restricție fizică semnificativă. Aproximația de mai sus ne permite să obținem pentru operatorul de densitate o ecuație diferențială (operatorială) de ordinul întâi [22]. Așa cum fotonii părăsesc mediul activ foarte rapid, sistemul pierde legătura cu trecutul său. Aceasta înseamnă că cunoașterea operatorului de densitate în momentul de timp $t = t_0$ este suficientă pentru determinarea operatorului de densitate pentru orice $t > t_0$.

Astfel, substituind ecuația (3) în (2) obținem următoarea ecuație pentru valoarea medie a unui operator atomic arbitrar

$$\dot{\mathcal{O}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} H_0 t} \mathcal{O}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \quad (\text{cu } H_0 = \sum_{j=1}^N \mathbf{h} \omega_j S_{33}^{(j)})$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \tilde{\mathcal{O}}(t) \rangle &= i \frac{e}{2} \sum_{j=1}^N \langle [S_{22}^{(j)} - S_{11}^{(j)}, \tilde{\mathcal{O}}(t)] \rangle - \frac{1}{2} \sum_{j,l=1}^N \{ \mathbf{g}_{jl}^{(1)} \langle S_{31}^{(l)} [S_{13}^{(j)}, \tilde{\mathcal{O}}(t)] \rangle + \mathbf{g}_{jl}^{(1)*} \langle [\tilde{\mathcal{O}}(t), S_{31}^{(l)}] S_{13}^{(j)} \rangle \} - \\ &- \frac{\hbar}{2} \sum_{j,l=1}^N \{ \mathbf{g}_{jl}^{(2)} \langle S_{32}^{(l)} [S_{23}^{(j)}, \tilde{\mathcal{O}}(t)] \rangle + \mathbf{g}_{jl}^{(2)*} \langle [\tilde{\mathcal{O}}(t), S_{32}^{(l)}] S_{23}^{(j)} \rangle \} - \frac{\hbar'}{2} \sum_{j,l=1}^N \{ \mathbf{g}_{jl}^{(1)} \langle S_{31}^{(l)} [S_{23}^{(j)}, \tilde{\mathcal{O}}(t)] \rangle + \mathbf{g}_{jl}^{(2)*} \langle [\tilde{\mathcal{O}}(t), S_{32}^{(l)}] S_{13}^{(j)} \rangle \} - \\ &- \frac{\hbar'}{2} \sum_{j,l=1}^N \{ \mathbf{g}_{jl}^{(2)} \langle S_{32}^{(l)} [S_{13}^{(j)}, \tilde{\mathcal{O}}(t)] \rangle + \mathbf{g}_{jl}^{(2)*} \langle [\tilde{\mathcal{O}}(t), S_{31}^{(l)}] S_{23}^{(j)} \rangle \}, \end{aligned} \quad (4)$$

unde

$$\gamma_{jl}^{(\beta)} = \gamma_{jl}(\omega_{3\beta}) = \chi_{jl}(\omega_{3\beta}) + i\Omega_{jl}(\omega_{3\beta}),$$

și

$$c_{jl}(\omega_{3b}) = \frac{3}{2} \{ [1 - \cos^2 \mathbf{x}] \frac{\sin(\omega_{3b} r_{jl}/c)}{\omega_{3b} r_{jl}/c} + [1 - 3 \cos^2 \mathbf{x}] \left[\frac{\cos(\omega_{3b} r_{jl}/c)}{(\omega_{3b} r_{jl}/c)^2} - \frac{\sin(\omega_{3b} r_{jl}/c)}{(\omega_{3b} r_{jl}/c)^3} \right] \},$$

$$\Omega_{jl}(\omega_{3b}) = \frac{3}{4} \{ [-1 - \cos^2 \mathbf{x}] \frac{\cos(\omega_{3b} r_{jl}/c)}{\omega_{3b} r_{jl}/c} + [1 - 3 \cos^2 \mathbf{x}] \left[\frac{\sin(\omega_{3b} r_{jl}/c)}{(\omega_{3b} r_{jl}/c)^2} + \frac{\cos(\omega_{3b} r_{jl}/c)}{(\omega_{3b} r_{jl}/c)^3} \right] \},$$

Aici $\tau_{3\beta}^{-1} = \frac{4}{3} \frac{d_{3\beta}^2 \omega_{3\beta}^3}{\hbar c^3}$ reprezintă rata de emisie spontană a unui singur radiator în

spațiul liber și ξ ne dă unghiul dintre direcțiile momentului dipolar $\mathbf{d}_{3\beta}$ și \mathbf{r}_{jl} , unde $\mathbf{r}_{jl} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l$, iar $\varepsilon = \omega_{21} \tau_{31}$ și $\tau = t / \tau_{31}$. De menționat ca termenul $\eta' = \tau_{31} / \tau_{21}$ rezultă din interferența cuantică dintre tranzițiile $|3\rangle \rightarrow |1\rangle$ și $|3\rangle \rightarrow |2\rangle$ și este sensibil la orientarea mutuală a momentelor dipolare ale tranzițiilor atomice respective. Dacă momentele dipolare sînt paralele, atunci termenul cross-damping $\gamma_{21} = \tau_{21}^{-1}$ are valoarea maximă ($\tau_{21} = \sqrt{\tau_{31} \tau_{32}}$), iar dacă momentele dipolare sînt perpendiculare, atunci $\gamma_{21} = 0$ și $\eta' = 0$.

Părțile reală și imaginară ale parametrului colectiv $\gamma_{jl}(\omega_{3\beta})$ depind puternic de distanța interatomică r_{jl} și de orientarea spațială a momentelor dipolare $\mathbf{d}_{3\beta}$. Ambele părți, reală și imaginară, ale parametrului $\gamma_{jl}(\omega_{3\beta})$ tind spre zero în cazul distanțelor interatomice mari, deoarece în acest caz nu există o interacțiune între emițători. Pentru distanțele interatomice mici, partea reală tinde spre unitate, iar partea imaginară tinde spre potențialul static al interacțiunii dipol-dipol.

Pentru a cerceta dinamica colectivă a unei perechi de atomi cu trei niveluri energetice în prezența fenomenului de interferență dintre canalele de emisie spontană și pentru a determina rolul efectelor colective în emisia spontană colectivă, vom obține un sistem închis de ecuații diferențiale pentru operatorii atomici.

III. Cinetica cuantică a unei perechi de radiatori

Utilizînd ecuația (4), ținînd cont că $\tilde{O}(t) \equiv S_{\alpha\alpha}$, unde $S_{\alpha\alpha} = \sum_{i=1}^N S_{\alpha\alpha}^{(i)}$ și, respectiv,

$\tilde{O}(t) \equiv S_{3\alpha}^{(i)} S_{\alpha 3}^{(j)}$, ($\alpha = 1, 2$), obținem următorul sistem de ecuații diferențiale de ordinul întâi:

$$\begin{aligned}
 \dot{\mathcal{X}}_0 &= -(1+\eta)X_0 - \chi_{ab}^{(1)}X_1 - \eta\chi_{ab}^{(2)}X_2 - \frac{\eta'}{2}(\gamma_{ab}^{(1)} + \gamma_{ab}^{(2)*})X_4 - \frac{\eta'}{2}(\gamma_{ab}^{(1)*} + \gamma_{ab}^{(2)})X_5, \\
 \dot{\mathcal{X}}_1 &= -(1+\eta)X_1 - \chi_{ab}^{(1)}X_3 - \frac{\eta'}{2}\gamma_{ab}^{(1)}X_6 - \frac{\eta'}{2}\gamma_{ab}^{(1)*}X_7 + 2\chi_{ab}^{(1)}X_8, \\
 \dot{\mathcal{X}}_2 &= -\eta\chi_{ab}^{(2)}X_0 - (1+\eta)X_2 + \eta\chi_{ab}^{(2)}X_3 - \frac{\eta'}{2}\gamma_{ab}^{(2)*}X_6 - \frac{\eta'}{2}\gamma_{ab}^{(2)}X_7 + 4\eta\chi_{ab}^{(2)}X_8, \\
 \dot{\mathcal{X}}_3 &= -\chi_{ab}^{(1)}X_1 - (1+\eta)X_3 - \frac{\eta'}{2}\gamma_{ab}^{(1)}X_4 - \frac{\eta'}{2}\gamma_{ab}^{(1)*}X_5 + 2X_8, \\
 \dot{\mathcal{X}}_4 &= -\frac{\hbar'}{2}\mathbf{g}_{ab}^{(1)*}X_0 + \frac{\hbar'}{2}(\mathbf{g}_{ab}^{(1)*} - \mathbf{g}_{ab}^{(2)})X_3 + (ie - 1 - \hbar)X_4 - \frac{1}{2}(\mathbf{g}_{ab}^{(1)*} + \hbar\mathbf{g}_{ab}^{(2)})X_6 + \hbar'(2\mathbf{g}_{ab}^{(1)*} + \mathbf{g}_{ab}^{(2)})X_8, \\
 \dot{\mathcal{X}}_5 &= -\frac{\hbar'}{2}\mathbf{g}_{ab}^{(1)}X_0 + \frac{\hbar'}{2}(\mathbf{g}_{ab}^{(1)} - \mathbf{g}_{ab}^{(2)*})X_3 - (ie + 1 + \hbar)X_5 - \frac{1}{2}(\mathbf{g}_{ab}^{(1)} + \hbar\mathbf{g}_{ab}^{(2)*})X_7 + \hbar'(2\mathbf{g}_{ab}^{(1)} + \mathbf{g}_{ab}^{(2)*})X_8, \\
 \dot{\mathcal{X}}_6 &= -\frac{\eta'}{2}\gamma_{ab}^{(2)}X_1 - \frac{\eta'}{2}\gamma_{ab}^{(1)*}X_2 - \frac{1}{2}(\gamma_{ab}^{(1)*} + \eta\gamma_{ab}^{(2)})X_4 - (ie - 1 - \eta)X_6 + 2\eta'X_8,
 \end{aligned} \tag{5}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{X}_7 &= -\frac{\eta'}{2} \gamma_{ab}^{(2)*} X_1 - \frac{\eta'}{2} \gamma_{ab}^{(1)} X_2 - \frac{1}{2} (\gamma_{ab}^{(1)} + \eta \gamma_{ab}^{(2)*}) X_5 - (i\epsilon + 1 + \eta) X_7 + 2\eta' X_8, \\ \mathcal{X}_8 &= -2(1 + \eta) X_8. \end{aligned}$$

Aici am introdus următoarele notații:

$$\begin{aligned} X_0 &= \langle S_{33}^{(a)} \rangle + \langle S_{33}^{(b)} \rangle, \quad X_1 = \langle S_{31}^{(a)} S_{13}^{(b)} \rangle + \langle S_{31}^{(b)} S_{13}^{(a)} \rangle, \quad X_2 = \langle S_{32}^{(a)} S_{23}^{(b)} \rangle + \langle S_{32}^{(b)} S_{23}^{(a)} \rangle, \\ X_3 &= \langle S_{33}^{(a)} S_{11}^{(b)} \rangle + \langle S_{33}^{(b)} S_{11}^{(a)} \rangle, \quad X_4 = \langle S_{31}^{(a)} S_{23}^{(b)} \rangle + \langle S_{31}^{(b)} S_{23}^{(a)} \rangle, \quad X_5 = \langle S_{32}^{(a)} S_{13}^{(b)} \rangle + \langle S_{32}^{(b)} S_{13}^{(a)} \rangle, \\ X_6 &= \langle S_{33}^{(a)} S_{21}^{(b)} \rangle + \langle S_{33}^{(b)} S_{21}^{(a)} \rangle, \quad X_7 = \langle S_{33}^{(a)} S_{12}^{(b)} \rangle + \langle S_{33}^{(b)} S_{12}^{(a)} \rangle, \quad X_8 = \langle S_{33}^{(a)} S_{33}^{(b)} \rangle, \\ \chi_{ab}^{(1)} &= \chi_{ab}(\omega_{31}), \quad \chi_{ab}^{(2)} = \chi_{ab}(\omega_{32}), \quad \Omega_{ab}^{(1)} = \Omega_{ab}(\omega_{31}), \quad \Omega_{ab}^{(2)} = \Omega_{ab}(\omega_{32}). \end{aligned}$$

În general, pentru un număr arbitrar de radiatori este imposibil a obține un sistem închis exact de ecuații pentru variabilele atomice colective, deoarece ecuațiile pentru corelatorii atomici de ordinul întâi sînt reprezentate prin corelatorii atomici de ordinul doi; ecuațiile pentru corelatorii atomici de ordinul doi sînt reprezentate prin corelatorii atomici de ordinul trei și așa mai departe. Pentru sistemele mono- și biatomic putem totuși obține un sistem exact de ecuații diferențiale de ordinul întâi. Evident că sistemele mono- sau biatomic reprezintă modele elementare, dar oferă unele soluții pentru cazurile cu sisteme poliatomic. Totuși pot fi obținute și soluții exacte pentru operatorii atomici ai emițătorilor ce sînt implicați în dezintegrearea spontană.

În absența efectelor cuantice de interferență, $\eta' = 0$, soluțiile exacte pentru operatorii atomici ai sistemului cu doi atomi cu trei niveluri energetice pot fi obținute utilizînd ecuațiile (5):

$$\begin{aligned} X_0 &= 2X_8(0) \left\{ \frac{1+h-2h^2 c_{ab}^{(2)2}}{(1+h)^2 - h^2 c_{ab}^{(2)2}} - \frac{1+h+c_{ab}^{(1)2}}{(1+h)^2 - c_{ab}^{(1)2}} \right\} e^{-2(1+\eta)t} + \{ [X_3(0) + 2X_8(0) \frac{1+h+c_{ab}^{(1)2}}{(1+h)^2 - c_{ab}^{(1)2}}] \cosh(c_{ab}^{(1)}t) - \\ &- [X_1(0) + 2X_8(0) \frac{(2+h)c_{ab}^{(1)}}{(1+h)^2 - c_{ab}^{(1)2}}] \sinh(c_{ab}^{(1)}t) + [X_0(0) - X_3(0) - 2X_8(0) \frac{1+h-2h^2 c_{ab}^{(2)2}}{(1+h)^2 - h^2 c_{ab}^{(2)2}}] \cosh(hc_{ab}^{(2)}t) - \\ &- [X_2(0) + 2X_8(0) \frac{h(1+2h)c_{ab}^{(2)}}{(1+h)^2 - h^2 c_{ab}^{(2)2}}] \sinh(hc_{ab}^{(2)}t) \} e^{-(1+\eta)t}, \\ X_1 &= -2X_8(0) \frac{(2+h)c_{ab}^{(1)}}{(1+h)^2 - c_{ab}^{(1)2}} e^{-2(1+\eta)t} + \{ [X_1(0) + 2X_8(0) \frac{(2+h)c_{ab}^{(1)}}{(1+h)^2 - c_{ab}^{(1)2}}] \cosh(c_{ab}^{(1)}t) - \\ &- [X_3(0) + 2X_8(0) \frac{1+h+c_{ab}^{(1)2}}{(1+h)^2 - c_{ab}^{(1)2}}] \sinh(c_{ab}^{(1)}t) \} e^{-(1+\eta)t}, \\ X_2 &= -2X_8(0) \frac{(1+2h)c_{ab}^{(2)}}{(1+h)^2 - h^2 c_{ab}^{(2)2}} e^{-2(1+\eta)t} + \{ [X_2(0) + 2X_8(0) \frac{h(1+2h)c_{ab}^{(2)}}{(1+h)^2 - h^2 c_{ab}^{(2)2}}] \cosh(hc_{ab}^{(2)}t) - \\ &- [X_0(0) - X_3(0) - 2X_8(0) \frac{1+h-2h^2 c_{ab}^{(2)2}}{(1+h)^2 - h^2 c_{ab}^{(2)2}}] \sinh(hc_{ab}^{(2)}t) \} e^{-(1+\eta)t}, \\ X_3 &= -2X_8(0) \frac{1+h+c_{ab}^{(1)2}}{(1+h)^2 - c_{ab}^{(1)2}} e^{-2(1+\eta)t} + \{ [X_3(0) + 2X_8(0) \frac{1+h+c_{ab}^{(1)2}}{(1+h)^2 - c_{ab}^{(1)2}}] \cosh(c_{ab}^{(1)}t) - \\ &- [X_1(0) + 2X_8(0) \frac{(2+h)c_{ab}^{(1)}}{(1+h)^2 - c_{ab}^{(1)2}}] \sinh(c_{ab}^{(1)}t) \} e^{-(1+\eta)t}. \end{aligned} \tag{6}$$

În continuare, vom cerceta numeric sistemul de ecuații (5) pentru $\eta' \neq 0$, și soluția reprezentată prin expresia (6) în cazul cînd $\eta' = 0$.

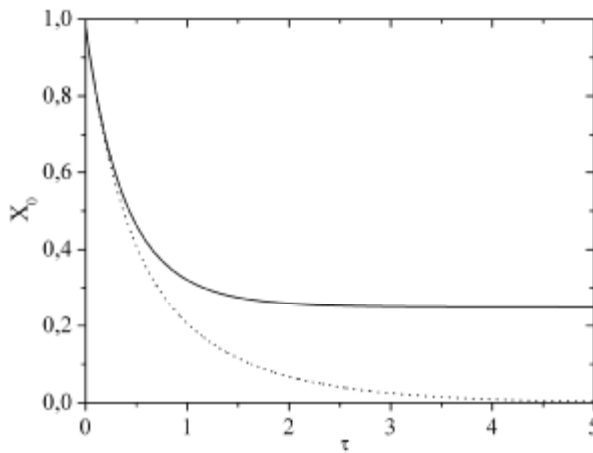


Fig. 1. Dependenta temporară a populației colective $X_0(\tau)$. $r_{ab}/\lambda=0.01$, $\varepsilon=0.1$, $\xi=0$, $\eta=1$, $\eta'=1$ pentru curba continuă ($\eta'=0$ pentru curba punctată).

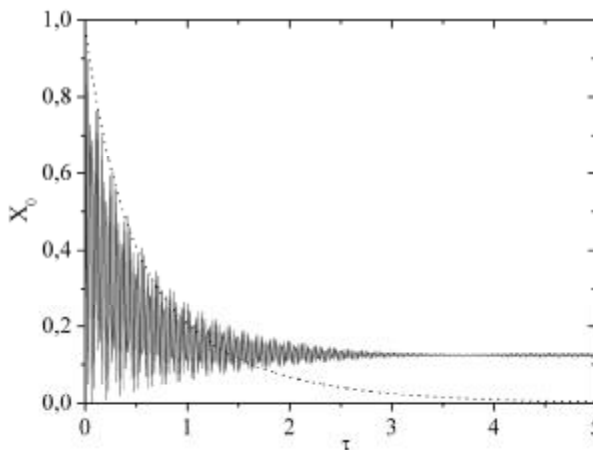


Fig. 2. Dependenta temporară a populației colective $X_3(\tau)$. $r_{ab}/\lambda=0.01$, $\varepsilon=0.1$, $\xi=0$, $\eta=1$, $\eta'=1$ pentru curba continuă ($\eta'=0$ pentru curba punctată).

În fig. 1 este prezentată dependența temporară a populației colective X_0 a nivelului excitat $|3\rangle$ când inițial unul din atomi (fie atomul a) se afla pe acest nivel, iar celălalt (adică atomul b) se află în starea de bază $|1\rangle$. Intervalul interatomic este $\frac{r_{ab}}{\lambda} = 0.01$. Pentru simplitate, s-a considerat că ratele emisiei spontane de pe nivelul excitat pe cel de baza sînt egale ($\eta=1$). În fig. 1 curba continuă caracterizează dinamica cuantica în prezența efectelor de interferență, adică când $\eta'=1$, iar curba punctată în lipsa lor, adică pentru $\eta'=0$. Se observă că în primul caz atomii tind să rămîină pe nivelul excitat un timp mai mare decît timpul de emisie spontană, spre deosebire de cazul doi cînd avem o lege exponențială de comportare a populației nivelului excitat. Efectul de frînare a dinamicii colective se explică în felul următor: atomul excitat a poate să treacă în starea de bază $|2\rangle$ sau $|1\rangle$, dacă fotonul emis la această tranziție poate fi absorbit de atomul b ce se afla inițial în starea $|1\rangle$, care se realizează numai dacă momentele dipolare respective nu sînt ortogonale,

adică $\eta' \neq 0$. În acest caz, atomul a are două posibilități pentru a ajunge în una din stările de bază. De exemplu, la tranziția în starea de baza $|1\rangle$ avem următoarele posibilități: i) directă, adică $|3\rangle \rightarrow |1\rangle$; ii) indirectă, adică $|3\rangle \rightarrow |2\rangle \rightarrow |1\rangle$. Aceste canale de tranziție interferează distructiv, fapt care duce la frînarea emisiei spontane colective, iar fotonul emis va fi stocat de atomi (vezi fig 2: curba oscilantă ce descrie procesul de transfer al fotonului între atomi astfel încât unul din ei va fi în starea $|1\rangle$ iar celalalt în starea $|3\rangle$ și invers). La tranzițiile ortogonale, $\eta' = 0$, fotonul emis de atomul a , la tranziția $|3\rangle \rightarrow |2\rangle$, nu mai poate fi absorbit de atomul b care se afla inițial în starea $|1\rangle$. Astfel, procesele respective vor fi descrise de o lege exponențială (vezi curbele punctate în figurile 1 și 2).

În concluzie, vom menționa că efectele de interferență cuantică între canalele de emisie spontană pot fi un instrument convenabil de a manipula procesele colective într-un sistem atomic cu multe niveluri energetice. În particular, emisia spontană colectivă poate fi frînată considerabil stocînd fotonul în sistemul atomic.

Cercetările expuse în acest articol au fost efectuate în cadrul proiectului 307b/s al UTM.

Bibliografie

1. Dicke, R. H., *Phys. Rev.*, 1954, 3, 99.
2. Ernst, V. and Stehle, P., *Phys. Rev.*, 1968, 176, 1456.
3. Allen, L. and Eberly, J. H., *Optical Resonance and Two-Level Atoms*, New York, 1975.
4. Crubellier, A., Liberman, S., Pillet, P., *Opt. Commun.* 33, 143 (1980); Haake, F., Reibold, R., *Phys. Lett.*, 1982, 92A, 29.
5. Gross, M. and Haroche, S., *Physics Reports*, 1982, 93, 301; Bogolubov, N. N. Jr., Sadovnikov, B. I. and Shumovskii, A. S., *Superradiance* Dubna, JINR, 1987; Andreev, V., Emel'yanov, V. I. and Il'inski, Yu. A., *Cooperative Effects in Optics. Superfluorescence and Phase Transitions*, London, Institute of Physics Publishing, 1993.
6. Keitel, C. H., Scully, M.O., and Sussmann, G., *Phys. Rev.*, 1992, A 45, 3242.
7. Enaki, N. and Macovei, M., *Phys. Rev.*, 1997, A 56, 3274.
8. John, S. and Quang, T., *Phys. Rev. Lett.*, 1995, 74, 3419.
9. Evers, J., Kiffner, M., Macovei, M., Keitel, C. H., *Phys. Rev.*, 2006, A 73, 023804.
10. Hettich, C., Schmitt, J., Zitzmann, S., Kuhn, I., Gerhardt, V. *Sandoghdar Science*, 2002, 298, 385.
11. *IGE'97 Proceedings of the First International Induced Gamma Emission Workshop*, Predeal, Romania, Special Issue, 1997, Hyp. Int. 107.
12. Purcell, E. M., *Phys. Rev.*, 1946, 69, 681.
13. Haroche, S. and Raimond, J. M. *Adv. Atom. Molec. Phys.*, 1985, 20, 347.
14. Beterov, I. M. and Lerner, P. B., *Usp. Fiz. Nauk*, 1989, 159, 665.

15. John, S. and Wang, J., *Phys. Rev. Lett.*, 1990, 64, 2418;
Quang, T., Woldeyohannes, M., John, S. and Agarwal, G. S. *Phys. Rev. Lett.*, 1997, 79, 5238;
Soren Bay, Lambropoulos, P. and Klaus Molmer, *Phys. Rev.*, 1997, A 55, 1485;
16. Yaping Yang and Shi-yao Zhu, *Phys. Rev.*, 2000, A 61, 043809.
17. Gardiner, C. W., *Phys. Rev. Lett.*, 1986, 56, 1917;
Palma, G. M. and Knight, P. L., *Phys. Rev.*, 1989, A 39, 1962;
Walls, D. F. and Milburn, G. J., *Quantum Optics*, Berlin, Springer, 1995.
18. Macovei, M., Evers, J., Keitel, C. H. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, 91, 233601;
Macovei, M., Evers, J., Li, G.-x., Keitel, C. H. *Phys. Rev. Lett.*, 2007, 98, 043602.
19. Zhu, S. Y., Ricky, C. F., Chan, Chin Pang Lee, *Phys. Rev.*, 1995, A 52, 710;
Zhu, S. Y. and Scully, M. O. *Phys. Rev. Lett.*, 1996, 76, 388.
20. Milonni, P. W. *Opt. Commun.*, 1973, 8, 60;
Milonni, P. W. and Knight, P. L. *Phys. Rev.*, 1974, A 10, 1096;
Schuurmans, M. F. H. *Phys. Lett.*, 1974, 47A, 493.
21. Goldstein, E. V. and Meystre, P. *Phys. Rev.*, 1997, A 56, 5135;
Dung, Ho Trung and Ujihara, Kikuo *Phys. Rev.*, 1999, A 59, 2524.
22. Bogolyubov, N. N. and Bogolyubov, N. N. Jr. *Fiz. Elem. Chastits At. Yadra*, 1980, 11, 245.
23. Gardiner C. W., *Quantum Noise*, Berlin, Springer, 1996.

SLOWING OF THE COLLECTIVE SPONTANEOUS EMISSION DUE TO QUANTUM INTERFERENCE EFFECTS

Viorel Ciornea (Institute of Applied Physics)

Profir Bardetchi, Mihai Macovei (Technical University of Moldova)

The influence of interference effects and spatial separation on the collective quantum dynamics is analyzed in detail here. It is shown that the collective spontaneous emission can be slowed by means of collective and interference effects.

Prezentat la redacție la 16.10.06

CZU 539.21:004

UTILIZAREA CALCULATORULUI LA REZOLVAREA UNOR PROBLEME DIN FIZICA CORPULUI SOLID

Virgil Cheptea, Alexandru Marușenco

(Universitatea de Stat "A. Russo", Republica Moldova)

Se analizează trei metode de modelare a fenomenelor fizice. S-au elaborat programele respective. Eficacitatea fiecărei metode este verificată prin utilizarea lor la rezolvarea unor probleme deja studiate.

Este cunoscut faptul că primele calculatoare au fost elaborate pentru efectuarea calculelor numerice în domeniul fizicii și tehnicii (fizica atomului, aeronautica). Eficacitatea lor a determinat, în fond, dezvoltarea destul de rapidă a informaticii și pătrunderea ei în toate domeniile de activitate. Pe măsura perfecționării tehnicii de calcul, posibilitățile ei au crescut foarte mult: ea permite nu numai de a efectua calcule numerice destul de voluminoase, dar și de a obține rezultate în formă analitică, de exemplu, sub forma unei funcții care depinde de argumente. Rolul tehnicii de calcul a crescut și mai mult în legătură cu cerințele înalte față de precizia calculelor teoretice și a rezultatelor experimentale, necesare pentru înțelegerea fenomenelor din microlume. Utilizarea tehnicii de calcul a contribuit la apariția unor noi direcții de cercetare și a unor noi terminologii, cum ar fi: fizica numerică sau fizica asistată de calculator, care studiază aceleași fenomene ale fizicii, numai că metoda de cercetare este neobișnuită - ea constă în modelarea fenomenelor fizice cu ajutorul calculatorului. Deseori acest compartiment se mai numește modelarea computerizată a fenomenelor fizice (sau modelarea fenomenelor fizice asistată de calculator). În acest caz, mai întâi, se elaborează modelul fenomenului fizic, apoi, acest model se cercetează cu ajutorul calculatorului. De menționat că modelarea, ca mijloc de studiere, este pe larg folosită în fizică (modelul gazului ideal, modelul atomului, modelul nucleului, modelul gazului electronic etc.).

Însuși procedeul modelării fenomenelor fizice la calculator, convențional, poate fi divizat în patru etape: mai întâi, se elaborează modelul fizic al fenomenului ținându-se cont de tot ce este cunoscut despre el, urmează, apoi, descrierea matematică a fenomenului, utilizându-se legile fizice cunoscute (modelarea matematică). Pașii următori presupun elaborarea algoritmului pentru rezolvarea ecuațiilor matematice și a programei pentru calculator [1,2,5].

Modelarea matematică a fenomenelor fizice a fost folosită în fizică și pînă la apariția calculatoarelor. Legile lui Newton reprezintă un model matematic al mișcării mecanice, ecuațiile lui Maxwell, ecuația lui Schrödinger, de asemenea, reprezintă modele matematice. Simplitatea (ele au fost elaborate pentru cazul interacțiunii a două corpuri sau a mișcării unei particule în câmpul creat de cealaltă particulă) și precizia uimitoare cu care ele descriu fenomenele respective au permis elaborarea lor fără utilizarea tehnicii de calcul.

În cazul interacțiunii mai multor particule (generatoare cuantice, fizica corpului solid, fizica atomului și nucleului atomic etc.), ecuațiile diferențiale care le descriu sînt neliniare și necesită utilizarea tehnicii de calcul. Modelarea fenomenelor fizice se folosește pe larg și în cazul cînd rezolvarea unei careva probleme poate fi realizată nemijlocit prin metode deja cunoscute, înșă:

- instalația experimentală este prea costisitoare;
- durata cercetării experimentale este destul de mare;
- există mai multe variante de rezolvare și trebuie selectată cea optimală;
- fenomenul fizic studiat decurge foarte lent sau, din contra, foarte rapid;
- fenomenul fizic studiat decurge în regiuni spațiale foarte mici sau foarte mari [3, 4].

Asemenea probleme apar, de exemplu, la descrierea comportării purtătorilor de sarcină electrică în cristale, care poate fi făcută numai în cadrul fizicii cuantice. Descrierea comportării electronilor în cristale din punct de vedere cuantic are un caracter statistic. Teoria cuantică ne permite să analizăm probabilitatea realizării fenomenului dat, adică determinarea funcției de undă proprie a particulei date și valorile proprii ale energiei ei (spectrului energetic). Pentru aceasta se cere de rezolvat ecuația lui Schrödinger cu condițiile de graniță respective. De menționat, că electronii în cristal se află într-un cîmp potențial creat de celelalte particule care alcătuiesc cristalul. Rezolvarea ecuației Schrödinger, în majoritatea cazurilor, este imposibilă chiar și după unele simplificări ale ei (aproximația adiabatică, aproximația unielectronică, aproximația masei efective etc.). Înșă ea poate fi analizată utilizînd metode numerice de rezolvare cum ar fi, de exemplu, metoda Monte-Carlo, sau metoda diferențelor finite, utilizînd calculatorul [6]. În lucrare se analizează trei metode de modelare, a căror eficacitate este verificată prin aplicarea lor la rezolvarea unor probleme deja studiate, cum ar fi comportarea particulelor în gropi de potențial de forme arbitrare. Deoarece funcția de undă depinde de un număr mare de variabile (coordonate), rezolvarea numerică se complică. În lucrare se precaută forma unidimensională a gropii de potențial, la care, de altfel, se reduc multe probleme din fizica corpului solid, fizica atomului, spectroscopie și altele.

1. Metode de modelare a comportării particulelor într-o groapă de potențial

Problema constă în determinarea funcțiilor de undă și a valorilor energiei pentru o particulă, care se găsește într-un cîmp potențial unidimensional $U(x)$. Pentru aceasta e necesar de a rezolva ecuația staționară a lui Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (1)$$

Pentru determinarea valorilor funcțiilor de undă și ale energiei în cazul cînd particula se află într-o groapă de potențial de diferite forme, pot fi folosite mai multe metode numerice cum ar fi metoda diferențelor finite, metoda Monte-Carlo variațională și metoda lui Euler.

a) *Metoda diferențelor finite.*

Pentru aplicarea metodei diferențelor finite la rezolvarea ecuației diferențiale de ordinul doi, e necesar să cunoaștem condițiile de graniță de speța întâi, adică valorile funcției de undă la capetele unui careva segment, avînd în vedere că pătratul modulului funcției de undă determină probabilitatea aflării particulei în punctul dat [7]. Deoarece particula nu poate părăsi interiorul gropii de potențial în care se află, poate fi găsit un segment $[a,b]$, care include regiunea gropii de potențial, la ale cărei capete funcția de undă este egală cu zero.

Adică

$$\Psi(a) = \Psi(b) = 0$$

Împărțim segmentul $[a,b]$ în puncte $x_0=a, x_1, x_2, \dots, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n, x_{n+1}=b$. Notăm intervalul (pasul) între punctele x_i și x_{i+1} prin h_i :

$$h_i = x_{i+1} - x_i.$$

De obicei, intervalul între puncte se consideră constant ($h_i=h$) și calculul se simplifică. Însă funcția de undă, fiind continuă și finită, se schimbă lent în afara gropii de potențial și rapid în interiorul ei, de aceea vom lua pasul variabil. În regiunea variației lente a funcției pasul va fi mai mare; respectiv, în regiunea variației rapide, pasul va fi mai mic [8]. Această alegere mărește precizia calculului și micșorează timpul de efectuare a lui.

Notăm: $\Psi(x_i) = \Psi_i, \Psi'(x_i) = \Psi'_i, \Psi''(x_i) = \Psi''_i, x_{i+1/2} = x_i + h_i/2, x_{i-1/2} = x_i - h_i/2$

Prima derivată se aproximează prin relația [8]:

$$\Psi'_i \approx \frac{\Psi_{i+\frac{1}{2}} - \Psi_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}}$$

Pentru derivata a doua vom avea:

$$Y''_i = \frac{2Y_{i+1}}{h_i(h_i + h_{i-1})} + \frac{2Y_{i-1}}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} - \frac{2Y_i}{h_i h_{i-1}},$$

unde $\Psi_i = \Psi(x_i), \Psi''_i = \Psi''(x_i), h_i = x_{i+1} - x_i$.

În acest caz ecuația lui Schrödinger (1) în diferențe finite va avea forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2 m_i h_i (h_i + h_{i-1})} \psi_{i+1} + \left[\frac{\hbar^2}{2 m_i h_i h_{i-1}} + U_i \right] \psi_i - \frac{\hbar^2}{2 m_i h_{i-1} (h_i + h_{i-1})} \psi_{i-1} = E \cdot \psi_i, \quad (2)$$

unde $i = 1, 2, \dots, n$. Este evident că $U_i = U(x_i)$.

Observăm că (2) reprezintă un sistem de ecuații liniare, din care pot fi găsite necunoscutele Ψ_i corespunzătoare parametrului E . Sistemul de ecuații (2) nu are soluții pentru orice valori ale parametrului E , ci doar pentru cele care se numesc valori proprii ale matricei coeficienților. Evident, aceste valori proprii vor aproxima, cu careva precizie, valorile proprii ale energiei particulei pentru potențialul dat, însă soluția sistemului – vectorul cu componentele $(\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n)$, care corespunde parametrului dat E , va reprezenta funcțiile de undă proprii ale particulelor. Se poate demonstra că valorile și funcțiile proprii vor fi mai precise, dacă ordinea sistemului n va fi mai mare [8]. Problema constă în determinarea valorilor și vectorilor proprii pentru sistemul obținut. Notăm matricea coeficienților sistemului prin A , atunci vom avea:

$$A_{i,j} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{2}{m_i h_i (h_i + h_{i-1})}, & \text{dacă } j = i + 1; \\ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{2}{m_i h_{i-1} (h_i + h_{i-1})}, & \text{dacă } j = i - 1; \\ \left[\frac{\hbar^2}{2} \frac{2}{m_i h_i h_{i-1}} + U_i \right], & \text{dacă } j = i; \\ 0, & \text{pentru orice alt } j. \end{cases}$$

Sistemul (2) poate fi scris sub forma:

$$\sum_{j=1}^n A_{i,j} Y_j = E Y_i,$$

sau sub forma de matrice:

$$A \cdot \dot{\Psi} = E \dot{\Psi}. \quad (3)$$

Matricea A este o matrice tridiagonală și, în caz general, nu este simetrică, adică $A_{i,j} \neq A_{j,i}$. Ea va fi simetrică numai în cazul când $h_i = h$ și $m_i = m$ vor fi peste tot constante (în acest caz, $A_{i,i+1} = A_{i+1,i}$). Valorile proprii ale matricei A se pot obține și în cazul matricei nesimetrice, însă metodele de determinare a lor sînt cu mult mai rapide și eficiente anume în cazul matricelor tridiagonale simetrice. De aceea, vom face unele transformări prin care problema determinării valorilor proprii pentru o matrice nesimetrică se va reduce la problema stabilirii valorilor proprii pentru o matrice tridiagonală simetrică [7]. Pentru aceasta notăm:

$$L_i^2 = \frac{(h_i + h_{i-1})m_i}{2}. \quad (4)$$

Introducem o matrice B , astfel încît $B_{i,j} = L_i^2 A_{i,j}$ sau în forma matricială:

$$B = M \cdot A,$$

unde M - matricea diagonală cu elemente pe diagonala principală egale cu L_i^2 . Drept rezultat, matricea B va avea forma:

$$B_{i,j} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{h_i}, & \text{dacă } j = i + 1; \\ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{h_{i-1}}, & \text{dacă } j = i - 1; \\ \frac{\hbar^2}{2} \frac{(h_i + h_{i-1})}{h_i h_{i-1}}, & \text{dacă } j = i; \\ 0, & \text{pentru orice alt } j. \end{cases} \quad (4a)$$

Din (4a) se vede că B este o matrice simetrică. Într-adevăr, $B_{i,i+1} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{h_i} = B_{i+1,i}$.

Înmulțim ecuația matricială (3) cu M la stînga:

$$M A \dot{\Psi} = B \dot{\Psi} = E M \dot{\Psi}.$$

Matricea M poate fi scrisă sub forma:

$$M = L L, \quad (5)$$

unde L este matricea diagonală cu elemente pe diagonala principală egale cu

$$L_i = \sqrt{L_i^2} = \sqrt{\frac{(h_i + h_{i-1})m_i}{2}}.$$

Menționăm, că înmulțirea unei matrice cu o matrice unitară nu duce la schimbarea acestei matrice. Ținând cont de (5), facem următoarea transformare:

$$L^{-1}BL^{-1}L\dot{\Psi} = L^{-1}LLA\dot{\Psi} = EL^{-1}LL\dot{\Psi}, \quad (6)$$

unde L^{-1} - matricea inversă matricei L . Deoarece L este matrice diagonală, L^{-1} este matrice diagonală cu elemente $1/L_i$.

Notăm $H = L^{-1}BL^{-1}$, $\dot{\Psi} = L^{-1}\dot{\Phi}$.

Atunci (6) va avea forma:

$$H\dot{\Phi} = E\dot{\Phi}. \quad (7)$$

Se observă că H are aceleași valori proprii ca și matricea A , însă, deoarece H s-a obținut prin înmulțirea matricei simetrice cu o matrice diagonală, ea deasemenea este o matrice simetrică. Din (7) obținem:

$$H = L^{-1}MAL^{-1} = L^{-1}LLAL^{-1} = LAL^{-1},$$

de unde

$$H_{i,j} = \frac{L_i}{L_j} A_{i,j} = \sqrt{\frac{(h_i + h_{i-1})m_i}{(h_j + h_{j-1})m_j}} A_{i,j}.$$

În forma desfășurată, după transformările corespunzătoare, obținem:

$$H_{i,j} = \begin{cases} \frac{\mathbf{h}^2}{2} \frac{2}{h_i \sqrt{m_i m_{i+1}} (h_i + h_{i-1}) (h_i + h_{i+1})}, & \text{dacă } j = i + 1; \\ \frac{\mathbf{h}^2}{2} \frac{2}{h_{i-1} \sqrt{m_i m_{i-1}} (h_i + h_{i-1}) (h_{i-1} + h_{i-2})}, & \text{dacă } j = i - 1; \\ \frac{\mathbf{h}^2}{2} \frac{2}{m_i h_i h_{i-1}} + U_i, & \text{dacă } j = i; \\ 0, & \text{pentru orice alt } j. \end{cases}$$

Problema s-a redus la aflarea valorilor proprii E_k ale matricei tridiagonale simetrice H . Se știe că orice matrice $n \times n$ simetrică cu elemente reale are exact n valori proprii reale (nu obligatoriu distincte). Valorile proprii ale unei matrice reprezintă rădăcinile unui polinom, numit polinom caracteristic, care se obține din determinantul $\det(H - EI)$ (unde I - este o matrice unitară, H - o matrice arbitrară, E - valorile proprii ale matriciei H). Dacă H este o matrice simetrică, atunci polinomul caracteristic ei reprezintă al n -ea polinom al lui Shturm. Polinoamele lui Shturm se definesc în felul următor:

$$p_0 \equiv 1, \quad p_1(E) = H_{i,i} - E, \quad p_i(E) = (H_{i,i} - E)p_{i-1}(E) - H_{i,i-1}^2 p_{i-2}(E), \quad i = 2, \dots, n.$$

Dacă $c(E)$ este o funcție a cărei valoare, pentru E arbitrar, este egală cu numărul de coincidență a semnelor termenilor din șirul: $1, p_1(E), p_2(E), \dots, p_n(E)$, atunci este justă următoarea teoremă: valoarea funcției $c(E)$ este egală cu numărul de rădăcini ale polinomului p_n , mai mari sau egali cu E . Folosindu-ne de această teoremă și de faptul că toate valorile proprii se găsesc în limitele intervalului $(-||H||, ||H||)$, unde $||H||$ - norma matricei H , poate fi alcătuit după algoritmul determinării valorilor proprii E_k ale matricei H cu precizia dorită. Aplicînd acum metode numerice, se rezolvă sistemul de ecuații liniare și se găsesc vectorii

Φ^k corespunzătorilor valorilor E_k [8]. Totalitatea componentelor fiecăruia dintre acești vectori aproximează funcția de undă corespunzătoare.

b) *Metoda lui Euler.*

Conform metodei lui Euler [9], valoarea funcției de undă în punctul cu coordonata x_{i+1} poate fi determinată cunoscând valoarea acestei funcții și a derivatei ei în punctul x_i ($x_{i+1} = x_i + h$):

$$\Psi_{i+1} = \Psi_i + h\Psi'_i; \Psi'_{i+1} = \Psi'_i + h\Psi''_i. \quad (8)$$

A doua derivată o stabilim din ecuația lui Schrödinger:

$$\Psi''_i = \frac{2m}{\hbar^2} (U_i - E)\Psi_i.$$

Astfel, cunoscând valoarea lui Ψ_i și Ψ'_i , putem afla Ψ_{i+1} și Ψ'_{i+1} și așa mai departe. Din (8) putem determina derivata a doua numai dacă cunoaștem valoarea proprie a energiei E . Cu cât E diferă mai mult de valoarea proprie, cu atât mai degrabă începe să diverge soluția obținută prin metoda lui Euler, invers: cu cât E se apropie de valoarea proprie, cu atât funcția de undă diverge la o distanță mai mare. Folosind aproximațiile succesive, stabilim valori proprii ale energiei și funcții de undă corespunzătoare.

c) *Metoda Monte-Carlo variațională*

În scopul determinării graniței de sus pentru valoarea energiei în stare de bază, se aplică principiul variațional. Principiul variațional presupune că, pentru o funcție arbitrară $\phi(x)$, ce satisface condiția:

$$\langle f | f \rangle = \int f^*(x)f(x)dx = 1, \quad (9)$$

se respectă inegalitatea:

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle f | \hat{H} f \rangle = \int f^*(x)\hat{H}f(x)dx \geq E_0, \quad (10)$$

unde H – hamiltonianul, E_0 - energia stării de bază [6].

Inegalitatea (10) constituie baza metodei variaționale. Procedura constă în alegerea funcției de undă de probă, a cărei formă este argumentată fizic și care depinde de unul sau mai mulți parametri. Folosind numere aleatoare, se variază mărimea $\langle \hat{H} \rangle$, pînă la obținerea valorii minime a ei. Această valoare $\langle \hat{H} \rangle$ reprezintă granița de sus pentru energie [8].

Procedura Monte-Carlo constă din următoarele etape:

1. alegerea din considerente fizice rezonabile a valorilor funcției ϕ în punctele x_i ;
2. alegerea unui punct aleator x_i și modificarea valorii $\phi_i = \phi(x_i)$ cu o mărime aleatoare din intervalul $[-\delta, \delta]$;
3. calcularea variația energiei DE pentru $\langle \hat{H} \rangle$ (dacă $DE \leq 0$, atunci modificarea făcută pentru $\phi(x_i)$ se acceptă, în caz contrar nu se acceptă);
4. repetarea pașilor 2 și 3 pînă cînd $\langle \hat{H} \rangle$ devine constant.

În calitate de funcție inițială poate fi luată, de exemplu, funcția exponențială $e^{-\frac{x^2}{2}}$, care este finită, pară și descrește rapid cu îndepărtarea de la originea de coordonate [3].

2. Modelarea comportării microparticulei pentru diferite forme ale potențialului $U(x)$. Concluzii

Prezentăm rezultatele calculului prin metoda diferențelor finite pentru unele forme ale potențialului $U(x)$. Forma potențialului $U(x)$ (a gropii de potențial), valorile proprii ale funcțiilor de undă și a energiei proprii sînt prezentate în tabel și în figurile 1÷14.

Rezultatele experiențelor numerice pentru diferite forme ale potențialului $U(x)$

Forma potențialului.	Nivele energetice		0	1	2	3	4
	E, eV						
1. Groapa dreptunghiulară (fig.1, $a=2\text{nm}, U_0=0,23\text{eV}$) $U(x) = \begin{cases} U_0, & \text{dacă } x \geq a; \\ 0, & \text{onalt caz.} \end{cases}$	E, eV	analitic	0,0161778	0,0638236	0,1392387	0,2251332	
numeric		0,0161565	0,0637388	0,1390608	0,2249691		
2. Groapa cu o perturbație (fig. 3, $a=2\text{nm}, b=0,3\text{nm}, U_0=0,23\text{eV}, U_b=0,05\text{eV}$) $U(x) = \begin{cases} U_0, & \text{dacă } x \geq a; \\ 0, & \text{dacă } x \geq b; \\ U_b, & \text{onalt caz.} \end{cases}$	E, eV	analitic	Nu există				
numeric		0,0269593	0,0643124	0,1495502	0,2259788		
3. Oscilator armonic (fig. 7, $k = 1\text{eV/nm}^2$) $U(x) = \frac{kx^2}{2}$	E, eV	analitic	0,1380301	0,4140902	0,6901503	0,9662105	1,2422706
numeric		0,1380111	0,4140094	0,6899642	0,9658744	1,2417399	
4. Oscilator anarmonic (fig.11, $k=1\text{eV/nm}^2, b=3\text{eV/nm}^4$) $U(x) = \frac{kx^2}{2} + bx^4$	E, eV	analitic	Nu există.				
numeric		0,0814811	0,2694121	0,4975133	0,7527399	1,0298698	
5. Oscilator anarmonic (fig. 13, $k=1\text{eV/nm}^2, b=3\text{eV/nm}^4, a=1\text{eV/nm}^3$) $U(x) = \frac{kx^2}{2} + ax^3 + bx^4$	E, eV	analitic	Nu există.				
numeric		-5,574383	-4,478709	-3,437632	-2,459556	-1,55739	
6. Potențial liniar (fig. 9, $a=2\text{nm}, U_0=12\text{eV}$) $U(x) = x $	E, eV	analitic	Nu există.				
numeric		0,3425715	0,7865622	1,0925559	1,3749735	1,6210625	
7. Groapa de potențial dublă (fig. 5, $a=1\text{eV/nm}^2$) $U(x) = x^4 - a \cdot x^2$	E, eV	analitic	Nu există.				
numeric		-0,064388	0,0474144	0,3833415	0,7446413	1,1726616	

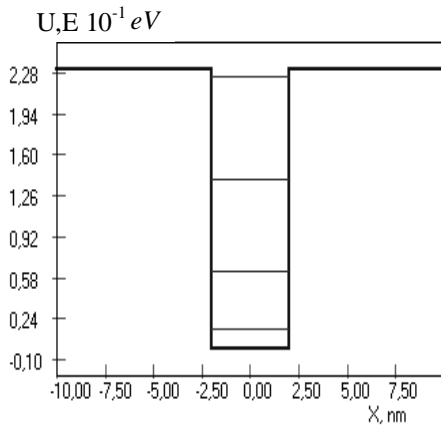


Fig. 1. Groapa de potențial dreptunghiulară cu nivele energetice.

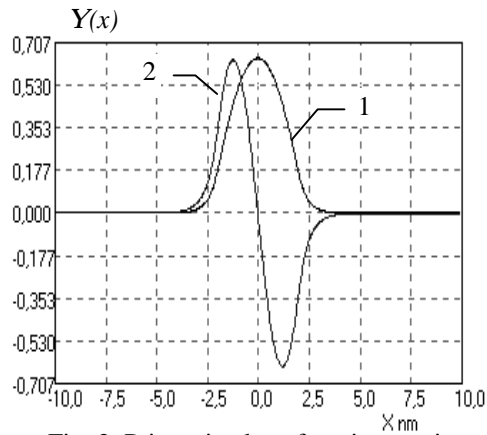


Fig. 2. Prima și a doua funcție proprie.

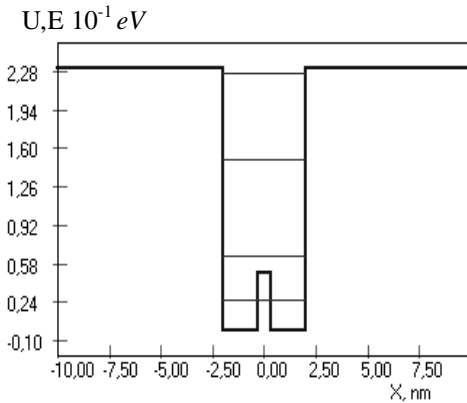


Fig. 3. Groapa de potențial cu o perturbație.

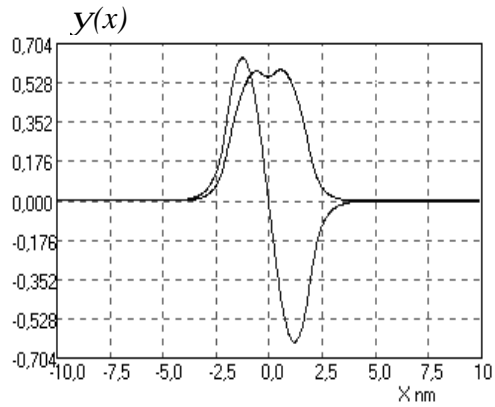


Fig. 4. I-a și II-a funcție proprie.

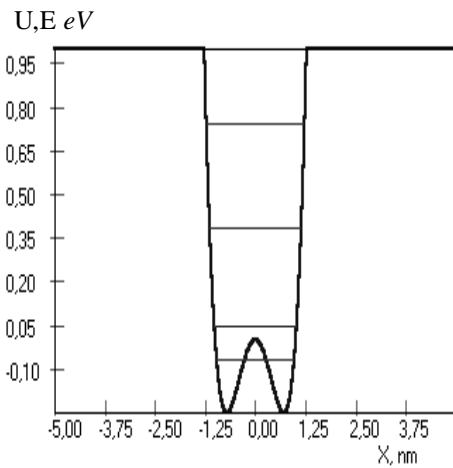


Fig. 5. Groapa de potențial dublă și nivele energetice.

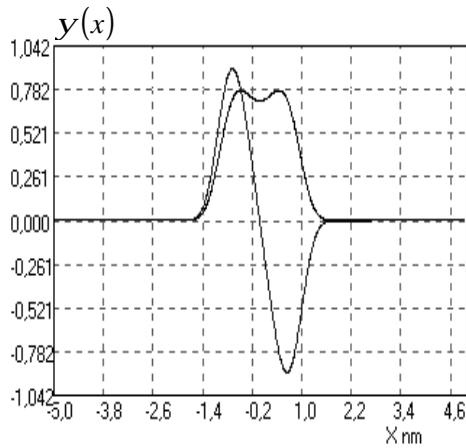


Fig. 6. Funcțiile de undă a electronului în groapa de potențial dublă.

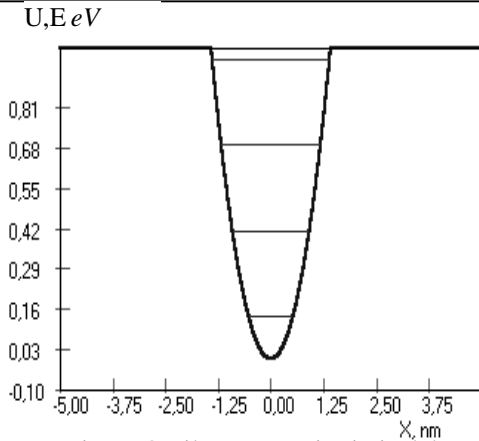


Fig. 7. Oscilator armonic și nivelele energetice corespunzătoare.

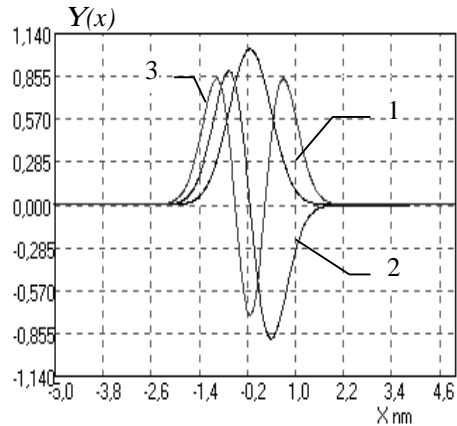


Fig. 8. Primele trei funcții proprii ale oscilatorului armonic.

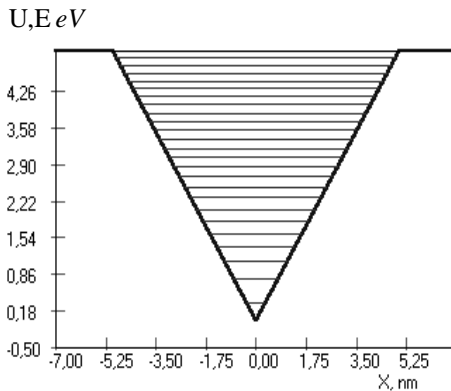


Fig. 9. Nivelele energetice pentru potențial linear.

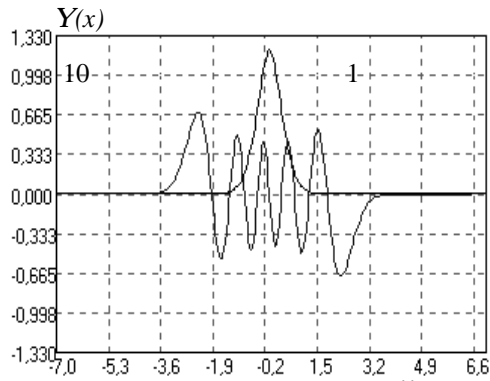


Fig. 10. Prima și a 10-a funcții proprii ale electronului.

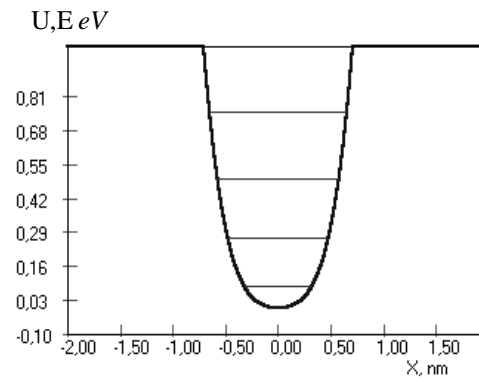


Fig. 11. Oscilator armonic de forma $(1/2)*k*x^2+b*x^4$.

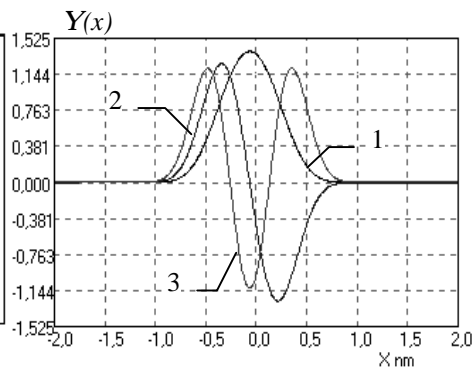


Fig. 12. Funcțiile de undă ale oscilatorului armonic simetric (nivelele 1,2,3).

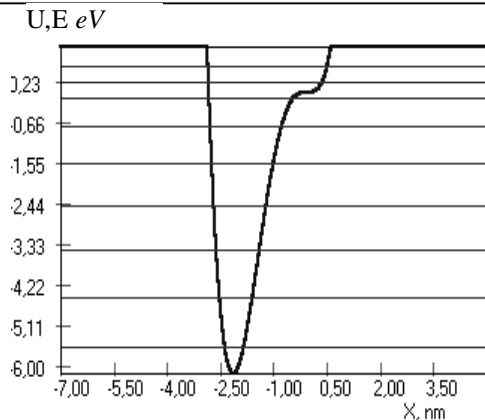


Fig. 13. Potențialul anarmonic de forma $(1/2)*k*x^2+b*x^3+c*x^4$ și nivelele energetice.

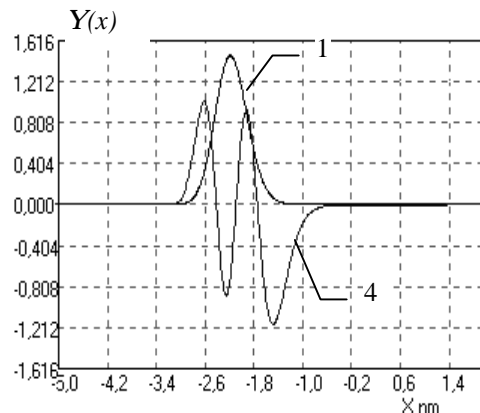


Fig. 14. Funcții proprii ale oscilatorului anarmonic.

Au fost analizate șapte forme ale câmpului potențial $U(x)$. În figurile 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, pe axa ordonatărilor sînt indicate înălțimea gropii de potențial (U) în eV și energia nivelelor energetice (E) în eV, iar pe axa absciselor dimensiunile liniare ale gropilor de potențial în nanometri. În figurile 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14 sînt prezentate funcțiile de undă ale electronilor pe primele nivele energetice. Înălțimea gropilor de potențial varia de la 0,8 eV pînă la 2,3 eV. Dimensiunile domeniului de calcul, în nanometri, pentru care se determină $Y(x)$ și (E), se aleg suficient de lat, pentru ca funcția de undă să fie egală cu zero la marginile acestui domeniu (în afara gropii de potențial), și suficient de mic, pentru ca pasul să fie relativ mic. Valoarea optimă a acestui domeniu se determină după cîteva experiențe numerice, fixîndu-se coordonatele punctelor, unde funcția de undă devine egală cu zero.

Ținînd cont că precizia determinării valorilor proprii a energiei și funcțiilor de undă, atît în cazul metodei diferențelor finite, cît și a metodei Euler este proporțională cu numărul de diviziuni pe axa absciselor, mărimea pasului $dx = x_{i+1} - x_i$ (distanța dintre două puncte vecine pentru care se determină $\Psi(x)$ și E) se determină ca raportul lungimeii segmentului de calcul către numărul de diviziuni. Numărul total de diviziuni în ambele programe a fost limitat la 1000. Precizia determinării energiei în ambele metode este de ordinul $(0,01 \div 0,001)\%$.

În cazul metodei diferențelor finite, precizia determinării energiei va crește, dacă rezolvarea se repetă utilizîndu-se pentru vectorul propriu valoarea lui din rezolvarea precedentă. Rezultatele obținute prin această metodă corelează cu cele obținute analitic (vezi tabelul, poziția 1 și 3). Metoda diferențelor finite poate fi folosită și pentru câmpuri potențiale nesimetrice. Ea permite, de asemenea, determinarea unui număr mai mare de funcții de undă și valori proprii ale energiei. Precizia determinării energiei prin metoda Monte – Carlo, în mare măsură, depinde de faptul cît de reușit din punct de vedere fizic a fost aleasă funcția inițială și de numărul de rezolvări consecutive (aproximații), pentru care în calitate de funcție inițială servește funcția obținută în rezolvarea precedentă. Astfel, pentru câmpul potențial prezentat în fig. 5, energia nivelului de bază după prima aproximație este $E_0 = -0,0595754$ eV, iar după a 20-a aproximație $E_0 = -0,06444$ eV. Dacă folosim

metoda diferențelor finite, pentru energia aceluiași nivel energetic se obține $E_0 = -0,064388$ eV. Deși metoda Monte – Carlo poate fi aplicată numai la determinarea stării de bază, iar soluțiile obținute cu ajutorul ei nu sînt atît de precise ca în cazul diferențelor finite: ea are și anumite priorități care constau în simplitatea algoritmului de calcul, poate fi eficientă în cazul bi – și tridimensional.

Bibliografie:

1. Мелькер А.И. *Моделирование эксперимента* // Новое в жизни науки и технике, серия физика, Москва, Знание, 1991, № 2, 64 с.
2. Кондратьев А. С., Лаптев В. В. *Физика и компьютер*. Ленинград, ЛГУ, 1989, 324 с.
3. Унистон П. *Искусственный интеллект*, Москва, Мир, 1984, 325 с.
4. Зарипов Р.Х. *Машинный поиск вариантов при моделировании творческого процесса*. Москва, Наука, 1983, 225 с.
5. Дородницын А.А. *Информатика: предмет и задачи*, Природа, 1985, №2, с. 26 -30.
6. Федоров В. В. *Теория оптимального эксперимента*. Москва, Наука, 1979, 340 с.
7. Давыдов А. С. *Квантовая механика*, Москва, Физматгиз, 1963, 748 с.
8. Tan J. H., Snider G. L., Chang L. D., and Hu E. L. *A self-consistent solution of Schrödinger – Poisson equations using a nonuniform mesh* // Appl. Phys., v. 68, Nr. 8, 15 Oct. 1990, p. 4071- 4076.
9. Ортега Дж. Пул У. *Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений*. Москва, Наука, 1986, 420 с.
10. Гульд Х., Тобочник Я. *Компьютерное моделирование в физике*, Москва, Мир, 1990, 399 с.

THE USE OF COMPUTER IN SOLVING PROBLEMS DEALING WITH THE PHYSICS OF SOLID OBJECTS

Virgil Cheptea, Alexandru Marușenco
(State University “Alec Russo”, Republic of Moldova)

Three methods of modeling of physical processes are analyzed. Programs for each of the methods are developed. The efficiency of each method is checked by using it while solving some problems which have already been investigated.

Prezentat la redacție la 30.01.06

CZU 621.311.592

OBTINEREA ȘI ANALIZA STRUCTURALĂ A COMPUȘILOR STRATIFICAȚI $Zn_xIn_2S_{3+x}$

Efim Aramă, Sergiu Bajura

(Universitatea de Stat de Medicină și Farmacie „Nicolae Testemițanu”)

În articol sînt expuse unele rezultate despre prepararea monocristalelor $Zn_xIn_2S_{3+x}$. Se descriu condițiile și parametrii de creștere pe baza instalației SDO cu stabilizator de temperatură "Repid". Se prezintă rezultatele analizei structurale cu raze X a rețelei cristaline a trei politipi de $Zn_2In_2S_4$ și a analogilor lor.

Actualitatea

Progresul tehnico-științific din ultimele decenii ale secolului XX se datorează într-o măsură considerabilă realizărilor științifice din domeniul semiconductorilor și a dispozitivelor elaborate pe baza lor. Interesul considerabil față de compușii semiconductori complecși se explică prin posibilitatea preparării materialelor cu proprietăți prestabilite. Evoluția științei despre studierea proprietăților materialelor și a fizicii noilor compuși semiconductori a impulsionat crearea aparatelor optoelectronice, a fizicii heterolaserilor și a structurilor varicon, a tehnicii laser, a fibrelor optice.

Utilizarea materialelor semiconductoare complexe permite obținerea semiconductorilor cu bandă interzisă largă și oferă posibilitatea modificării caracteristicilor lor optice și fotoelectrice, fapt care are o importanță deosebită atît pentru studiile fundamentale, cît și pentru aplicațiile practice. Din categoria semiconductorilor cu perspectivă fac parte și compușii formați în secțiunea $A^{II}C^{VI}-B_2^{III}C_3^{VI}$, inclusiv cei de tipul $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$, cristalele stratificate ($Zn_xIn_2S_{3+x}$, $x=1-5$) cu vacanțe stoechiometrice în rețeaua cristalină.

Pentru aplicațiile practice au o importanță majoră proprietățile valoroase ale acestor compuși, ca de exemplu, luminescența intensivă [1], fotosensibilitatea înaltă, îndeosebi în partea vizibilă și ultravioletă (UV) a domeniului spectral, stabilitatea la radiații [2, 3, 4].

Tehnica de preparare a monocristalelor

Metoda folosită pentru prepararea monocristalelor tioindaților de zinc și a analogilor lor, reacțiile chimice posibile, instalațiile utilizate pentru prepararea multor compuși semiconductori, inclusiv $A^{II}B_2^{III}C_4^{VI}$, au, de obicei, un caracter comun. În procesele tehnologice experimentale de obținere a cristalelor din faza gazoasă s-a folosit metoda transportului chimic, utilizîndu-se iodul în calitate de agent de transport. După rezultatele obținute și avantajele de creștere, această metodă s-a dovedit a fi cea mai eficientă din

punct de vedere tehnologic pentru materialele cercetate. Pentru compușii ce manifestă politipism în structura cristalină, metoda cristalizării din fază gazoasă permite prepararea monocristalelor la temperaturi relativ joase.

Tehnologia obținerii monocristalelor $ZnIn_2S_4$, $Zn_2In_2S_5$ și $Zn_3In_3S_6$ și a analogilor lor este elaborată pentru containere de cuarț în formă de fiole cu lungimea 150 mm și diametrul 1,6-2,20 mm. Masa totală a componentelor chimice luate în proporție stoichiometrică se încadrează în mărime de 2-4 g, concentrația agentului de transport fiind 4-5 mg. Presiunea remanentă în containere nu depășea 10^{-6} mm Hg [5].

Procesul tehnologic de evaporare și cristalizare s-a realizat în instalația cu trei secțiuni de tip „SDO” produsă în serie cu stabilizator de temperatură „Repid”. Repartizarea gradientului de temperatură de-a lungul containerului este prezentată în fig. 1. Folosirea acestei instalații cu modul ales de amplasare a containerelor prezintă avantaje prin faptul că procesul decurge concomitent în șase fiole.

Principala realizare tehnologică constă în faptul că, spre deosebire de metodologia generală, s-a reușit să se cumuleze reacțiile de sinteză și creștere a monocristalelor într-un singur ciclu tehnologic, efectuându-se simultan câteva experimente. În fiolă se introduceau elementele inițiale ultrapure cu stoichiometria și cantitatea agentului de transport prestabilite. Transportul substanțelor cu ajutorul iodului din zona fierbinte (T_1) în zona de creștere (T_2) (fig.1) se realiza neîntrerupt, deoarece în aceste zone existau condiții de echilibru diferite. În zona cu temperatura T_1 se formau calcogenizi în stare gazoasă, care erau transportați în zona cu temperatura T_2 , unde aveau loc reacțiile de cristalizare a cristalelor (condițiile de preparare a monocristalelor, grupa spațială și impuritățile conținute în elementele chimice sînt prezentate în tabelele 1 și 2).

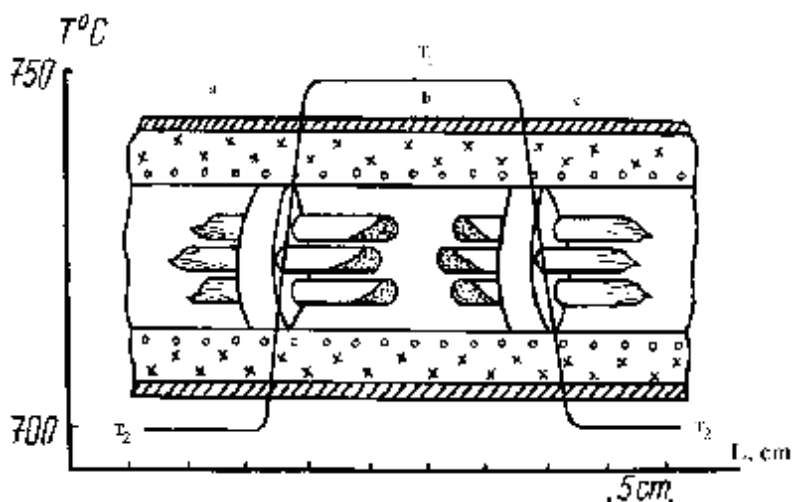


Fig. 1. Repartizarea temperaturilor în cuptorul cu trei secțiuni (a; b și c) în procesul de creștere a monocristalelor $Zn_xIn_2S_{3+x}$.

Temperaturile erau alese astfel, încât să se obțină cristale omogene după structură și modificarea politipică necesară. Este cunoscut prognosticul formării unor compuși noi pe baza $Zn_xIn_2S_{3+x}$ ($x=1, 2, 3$) cu substituirea cationilor [6]. Pe baza analizei variației parametrilor caracteristici pentru atomii metalelor din subgrupa III a sistemului periodic – In, Ga, Al, Br – s-a prognozat posibilitatea preparării unor familii noi de astfel de compuși. S-a reușit să se realizeze acest pronostic pe cale experimentală. Au fost obținute minimum două familii de compuși pe baza $x=1$ și $x=3$. În plus, prin substituirea unui atom de indiu cu galiu sau aluminiu, s-au obținut compuși cu bandă interzisă mai largă: Zn_3InGaS_6 și Zn_3InAlS_6 .

Rezultatele obținute și analiza lor

Monocristalele obținute aveau fațete naturale de oglindă cu aria suprafeței 0,7-1,0 cm^2 și grosimea $20 \div 100 \mu$, iar în cazuri mai rare pînă la 2 mm. Toți compușii polisulfizi cresc în formă de lamele hexagonale transparente la lumină. Analiza prin metoda izotopică a demonstrat prezența în cristale a iodului, concentrația lui fiind $(3,0-7,5) \cdot 10^{18} cm^{-3}$.

Tabelul 1.

Condițiile de preparare a sulfizilor stratificați, grupa spațială și conținutul impurităților ce se conțin în componente inițiale.

Compusul (politipul)	Temperatura, K		Grupa spațială	Conținutul impurităților ce influențează calitatea cristalelor
	T_1	T_2		
$ZnIn_2S_4$ (III)	1020	970	R3m	$5 \cdot 10^{-4}$ (Pb, Fe, Sb, Al, Ni, Bi)
$ZnIn_2S_4$ (II)a	1015	975	$P\bar{3}m1$	
$CdInGaS_4$	1170	970	R3m	
$CoInGaS_4$ (I)	1150	1070	$R\bar{3}m1$	$2 \cdot 10^{-5}$ (Hg, Cd)
$Zn_3In_2S_6$ (I)	1090	1050	$R\bar{3}m1$	
Zn_3InGaS_6	1150	1110	$P6_3mmc$	$5 \cdot 10^{-5}$ (P, Cl, As)
Zn_3InAlS_6	1240	1170	$P6_3mmc$	
$Zn_2In_2S_5$	1060	1020	R3m	$5 \cdot 10^{-5}$ (Tl, Zn, Ca, B)
Cd_3InGaS_6	1120	1090	hexagonală	

Parametrii de creștere optimală se aproximează prin calcule, aplicîndu-se expresiile analitice pentru starea de echilibru și viteza de transport și se verifică experimental. În absența constantelor caracteristice pentru compușii multicompenți, parametrii se aleg empiric. În rezultatul analizei datelor experimentale s-au ales următoarele reguli de selecție a condițiilor de creștere a cristalelor:

- viteza de transport nu trebuie să depășească viteza creșterii cristalelor în procesul inițierii lor;
- la alegerea temperaturii de cristalizare să se țină cont de polimorfism;

- în scopul eliminării creșterii policristaline, spațiul zonei de cristalizare trebuie să fie mai mare;
- pentru creșterea omogenă a cristalelor este necesară menținerea unei distribuiri uniforme a temperaturii în zona de cristalizare;
- când transportul se efectuează prin difuzie, cresc monocristale cu fețe perfecte;
- la utilizarea fiolelor cu secțiune mare, diferența de temperaturi dintre temperatura zonei de evaporare și cea de cristalizare trebuie să fie mică;
- alegerea reușită a condițiilor de transport are ca rezultat creșterea cristalelor ce corespund stoechiometriei inițiale a compusului.
- un rezultat relevant și convingător reprezintă politipii I-III ai tiondaților de zinc $ZnIn_2S_4$ pentru care s-a cercetat structura cristalină (fig. 2).

Structura rețelei elementare este descrisă pe baza împachetării compacte a anionilor și se divizează în pachete cu mai multe straturi legate între ele prin interacțiunea Van der Waals. Cationii sînt situați atît în golurile tetraedrice T, cît și în cele octaedrice O [5]. Cel mai cunoscut reprezentant al acestei familii este compusul $ZnIn_2S_4$ existent în numeroase forme politipice, care în calitate de fragment structural de bază conține pachetul S-ZnS-In_T-S-Zn_T-S. În toate modificările politipice, rețeaua octaedrică O este situată între două rețele tetraedrice legate cu prima prin vîrfurile comune, această regulă fiind valabilă și pentru compuşii $Zn_2In_2S_5$ și $Zn_3In_2S_6$.

Tabelul 2.

Condițiile de preparare a sulfizilor stratificați, grupa spațială și conținutul impurităților ce influențează proprietățile fizice ale cristalelor

Compusul (politipul)	Temperatura, K		Grupa spațială	Conținutul impurităților ce influențează calitatea cristalelor
	T_1	T_2		
$ZnIn_2S_4$ (III)	1020	970	R3m	$5 \cdot 10^{-4}$ (Pb, Fe, Sb, Al, Ni, Bi)
$ZnIn_2S_4$ (II)a	1015	975	$P\bar{3}m1$	
$CdInGaS_4$	1170	970	R3m	
$CoInGaS_4$ (I)	1150	1070	$R\bar{3}m1$	$2 \cdot 10^{-5}$ (Hg, Cd)
$Zn_3In_2S_6$ (I)	1090	1050	$R\bar{3}m1$	
Zn_3InGaS_6	1150	1110	$P6_3mmc$	$5 \cdot 10^{-5}$ (P, Cl, As)
Zn_3InAlS_6	1240	1170	$P6_3mmc$	
$Zn_2In_2S_5$	1060	1020	R3m	$5 \cdot 10^{-5}$ (Tl, Zn, Ca, B)
Cd_3InGaS_6	1120	1090	hexagonală	

Ținînd cont de coordonarea diferită a atomilor de indiu, se poate face concluză că compusul $ZnIn_2S_4$ conține trei tipuri de cationi. Consecutivitatea dislocării cationilor în toate pachetele, de obicei, este aceeași, dar există și politipul de simetrie centrală $ZnIn_2S_4$ (IIa) cu consecutivitatea simetriei de reflexie a

aranjării straturilor de cationi în două pachete ale celulei elementare: ... Zn – In_T – S – Zn_T – S ...

În cazul compușilor $Zn_2In_2S_5$ și $Zn_3In_2S_6$, structura se modifică parțial. Pentru $Zn_2In_2S_5$, rețeaua T cu cationi In_T se îndepărtează de rețeaua O și în pachet are loc următoarea consecutivitate a straturilor de atomi: S-Zn_T-S-In_O-S-Zn_T-S-In_T-S. În rețeaua compusului $Zn_3In_2S_6$ are loc o repartizare statistică a cationilor Zn_T și In_T, iar structura pachetelor este dată de consecutivitatea:

$$S \frac{Zn_T + In_T}{2} S Zn_T S In_O S Zn S \frac{Zn_T + In_T}{2} S.$$

Structura este central simetrică.

Centrele de inversie se află în centrele golurilor octaedrice și în centrele octaedrelor rețelei O. Perioada *C* a acestor monocristale stratificate se exprimă prin formula $C=P(X+3n)C_0$, unde *P* - numărul pachetelor în celula elementară, *X*- compusul, *n*=1, $C_0=3,1 \text{ \AA}$ - distanța dintre straturile sulfului de-a lungul axei *C*. S-a constatat că Zn_3InGaS_6 și Zn_3InAlS_6 , de asemenea, se cristalizează

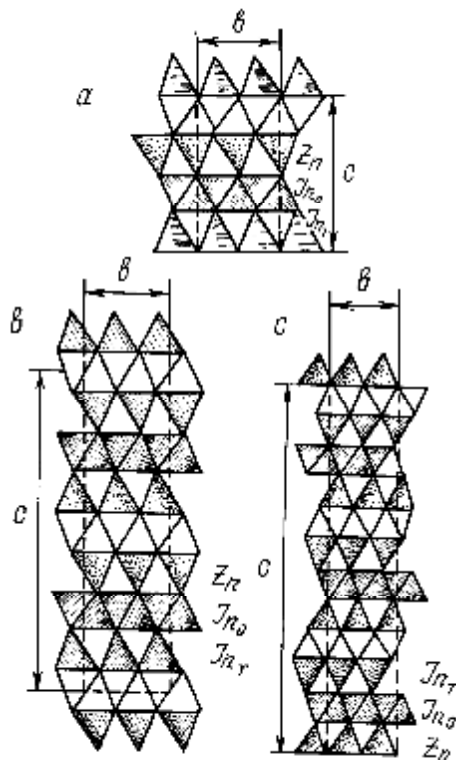


Fig. 2. Proiecția structurii modificațiilor politipice ale compusului $ZnIn_2S_4$ cu un (a), două (b) și trei (c) pachete pe planul (2110).

în celula elementară hexagonală stratificată cu perioadele rețelei $a=15,45 \text{ \AA}$ și $c=12,45 \text{ \AA}$. În golurile T și O ale împachetării compacte ale atomilor de sulf sînt incorporați cationi ai atomilor de Zn, In, Ga și Al. Gradul de ordonare depinde mult de monotonia procesului de răcire pînă la temperatura de cameră

a eșantioanelor. Luînd în considerație valoarea razelor ionice ale elementelor, se poate concluziona că cationii In^{3+} ocupă rețeaua O, cationii Zn^{2+} , Ga^{2+} și Al^{3+} sînt disponibili să se situeze atît în golurile O, cît și în golurile T. Distanțele medii In-S și Ga-S sînt egale respectiv cu 2,3 și 2,1 Å, iar distanța In-S în mediul octaedric al atomilor de indiu – 2,6 Å [7, 8, 9].

Pe baza analizei structurale cu raze X, s-a constatat că lamelele monocristaline a compușilor nominalizați sînt mărginite de planele $(01\bar{1}0)$ și (0001) . Cea mai mare viteză de creștere este caracteristică pentru planul $(2\bar{1}\bar{1}0)$.

Concluzii

Au fost elaborate condițiile de creștere a monocristalelor polisulfide prin metoda transportului chimic. S-au stabilit structurile cristaline $ZnIn_2S_4$ (II, III) și $Zn_3In_2S_6$ (I) și a familiei de sulfizi izovalenți pe baza lor. Toți compușii studiați au o structură stratificată. S-au determinat caracteristicile de creștere și specificul defectelor. Datele obținute servesc ca bază pentru interpretarea particularităților caracteristicilor fizice.

Bibliografie

1. Arama, E. *Luminescence of Mn in $ZnIn_2S_4$ (III)* // Anale Stiințifice ale Universității de Stat din Moldova. Seria “Științe fizico-matematice“, Chișinău, 2000, p. 159-162.
2. Aramă, E. *Recepționarea ultravioletului cu detectori pe sulfizi stratificați* // Intellectus, Chișinău, nr.4, 1999, p.72-75.
3. Zhitari, V.F., Moldovyan, N.A., Arama, E.D., Radautsan, S.I. *Short – Wavelength radiation detection on the of layered sulphides* // XV Annual Semiconductor Conference “CAS`92”, Sinaia, Romania, 1992, p.267-270.
4. Гальчинецкий, Л.Б., Кошкин, В.М., Кумаков, В.М. и др. *Эффект радиационной устойчивости полупроводников со стехиометрическими вакансиями* // Физика Твёрдого Тела, 1972, т.14, № 2, с. 646-648.
5. Aramă, E. Note nepublicate.
6. Доника, Ф.Г., Житарь, В.Ф., Радауцан, С.И. *Полупроводники системы $ZnS-In_2S_3$* , Кишинев, Штиинца, 1980, 150 с.
7. Арама, Е.Д., Житарь, В.Ф., Назаров, М.В. и др. *Получение и люминесцентно-топографическая диагностика $ZnIn_2S_4$* // VII Всесоюзная конференция по росту кристаллов, Москва, 1988, №1, с. 144-145.
8. Житарь, В.Ф., Арама, Е.Д., Мачуга, А.И. и др. *Влияние специфики кристаллической структуры $ZnIn_2S_4$ на оптическое поглощение* // Всесоюзная конференция по структуре полупроводников, Воронеж, 1989, с.8.

9. Abramova, T.V., Arama, E.D., Bazacutsa V.A. et al. *Recombination effects in g-quanta irradiated ZnIn₂S₄(III)* // Proceedings of the 8th international conference on ternary and multinary compounds, Kishinev, 1990, v.1, p. 405-408.

THE OBTAINING AND STRUCTURAL ANALYSIS OF THE FILM COMPOUNDS Zn_xIn₂S_{3+x}

Efim Aramă, Sergiu Bajura

(State University of Medicine and Pharmacy "Nicolae Testemițanu")

The paper presents some results about preparation of Zn_xIn₂S_{3+x} monocrystals. The conditions and parameters of growing on the basis of installation SDO with the temperature stabilizer „Repid” are described. The X rays results of structural analysis of crystalline structure of three polytypes of Zn₂In₂S₄ are presented.

Prezentat la redacție la 14.12.06

CZU621.315.592

SPECTRELE VIBRAȚIONALE ÎN INFRAROȘU ALE REȚELEI CRISTALINE A COMPUȘILOR SEMICONDUCTORI Zn_xIn₂S_{3+x}

Efim Aramă

(Universitatea de Stat de Medicină și Farmacie „Nicolae Testemițanu”)

Sînt studiate spectrele de reflexie a monocristalelor ZnIn₂S₄, Zn₂In₂S₅, Zn₃In₂S₆ în domeniul infraroșu (IR) și interpretate vibrațiile conform simetriei cristalelor. Se determină componentele longitudinale și transversale la divizarea fononilor, durata de existență a fononilor și forțele vibratorilor. Se explică particularitățile ce se manifestă în spectrele vibraționale de reflexie prin poziția structurală diferită pe care o ocupă atomii de Zn și In în golurile din împachetarea tetraedrică și octaedrică în toți compușii menționați.

Introducere

Calculul riguros al dinamicii rețelei cristaline este dificil din punct de vedere matematic și a fost realizat doar pentru cristale simple, care au un număr mic de atomi și simetrie perfectă a celulei primitive. Sînt cunoscute cîteva lucrări în care s-a calculat dinamica rețelei pentru cristalele NaCl, CsI [1], iar prelucrarea spectrelor a confirmat structura lor cubică [2, 3]. În ultimii ani se cercetează intensiv dinamica rețelei cristaline a materialelor semiconductoare stratificate. Pentru structuri mai complexe decît cele cubice, calculele nu s-au efectuat din cauza gradului mare de complexitate al acestora. S-a presupus însă [2] că particularitățile esențiale ale spectrului fononilor se

păstrează și pentru grupul compușilor micști, grup din care fac parte și compușii ternari stratificați. Anizotropia pronunțată a cristalelor $Zn_xIn_2S_{3+x}$ ($x=1; 2; \text{și } 3$) pune în evidență proprietăți specifice ce depind mult de structura cristalină.

Experiența arată că interacțiunile ionilor din interiorul straturilor sînt mai puternice decît cele dintre straturi sau dintre pachete. Drept urmare se poate discuta despre vibrații interne și vibrații externe. Vibrațiile interne sînt legate de deformațiile din interiorul unui singur strat. Frecvențele acestor vibrații sînt mari, corespunzînd unor numere de undă cuprinse aproximativ, în intervalul $200\div 3000\text{ cm}^{-1}$. Vibrațiile externe în cristale sînt datorate mișcării relative a straturilor unul față de altul, fără ca acestea să se deformeze. Ele sînt caracterizate de frecvențe mai joase ce ating valori pentru numărul de undă cuprinse în intervalul $10\div 200\text{ cm}^{-1}$. Deși în cristale stratificate forțele de interacțiune dintre pachete (sau straturi) sînt mici, ele sînt totuși responsabile de despicările unor benzi vibraționale în componente Davîdov [4]. Prezintă interes verificarea acestei ipoteze și pentru alți compuși cu un grad de complexitate mai înalt, ce pot exista în cîteva modificații politipice și care conțin un număr impunător de straturi într-un pachet. De asemenea, prezintă interes studierea naturii legăturilor slabe dintre straturi și influența lor asupra dinamicii rețelei cristaline. De clasa compușilor stratificați țin și compușii ternari $Zn_xIn_2S_{3+x}$. Pentru verificarea ipotezei menționate s-au întreprins mai multe studii experimentale, rezultatele cărora au fost interpretate în lucrările [5-9]. Ulterior, s-au efectuat studii fundamentale ale dinamicii rețelei cristaline și ale altor compuși ternari.

În cazul studierii spectrelor compușilor ternari $Zn_xIn_2S_{3+x}$ s-au utilizat metodele de bază ale spectroscopiei IR pentru cercetarea proprietăților optice ale cristalelor - spectroscopia de transmisie și de reflexie.

Dispersia constantelor optice

Monocristalele $Zn_2In_2S_4$, $Zn_2In_2S_5$, $Zn_2In_2S_6$ s-au dovedit a fi transparente în domeniul de frecvențe ale spectrului $20\div 150$ și $400\div 10000\text{ cm}^{-1}$. În domeniul de frecvențe unde cristalele erau netransparente ($150\div 400\text{ cm}^{-1}$), acolo unde efectele de reflexie ale fluxului de lumină la muchia posterioară pot fi neglijate, constantele optice s-au obținut din spectrele de reflexie conform metodelor descrise mai jos.

Calcularea constantelor fizice principale ale spectrelor vibraționale s-a efectuat cu ajutorul transformărilor Kramers-Krönig. Metoda Kramers-Krönig permite obținerea dependențelor spectrale ale constantelor optice cu atît mai corect, cu cît este mai larg domeniul spectral în care se măsoară coeficientul de reflexie. Amplituda coeficientului de reflexie R_0 la incidența normală a fluxului depinde de constantele optice n (indicele de refracție) și k (extincția) prin relația:

$$R_0 = \frac{n - ik - 1}{n - ik + 1}. \quad (1)$$

Întrucît coeficientul de reflexie R este definit prin unghiul de fază q :

$$R^{1/2} = R_0 \exp(iq), \quad (2)$$

$$\text{unde } q(w) = \frac{w}{p} \int_0^\infty \frac{\ln R(n)}{n^2 - w^2} dw;$$

atunci constantele optice n și k pot fi exprimate prin R și q :

$$n(w) = (1 - R)(1 + R - 2\sqrt{R} \cos q)^{-1}; \quad (3)$$

$$k(w) = \frac{2\sqrt{R} \sin q}{1 + R - 2\sqrt{R} \cos q}; \quad (4)$$

componentele reală (e') și imaginară (e'') ale permitivității dielectrice se determină din relațiile:

$$e' = n^2 - k^2; \quad e'' = 2nk. \quad (5)$$

Legea generală de dispersie pentru componenta imaginară a permitivității dielectrice în funcție de atenuare are forma [2]:

$$e'' = \sum_{i=1}^k \frac{f_i w_{TO_i}^2 w g_i}{(w_{TO_i}^2 - w^2) + w^2 g_i^2}, \quad (6)$$

unde γ_i este constanta de atenuare a vibratorului. Semilărgimea benzilor vibraționale respective este egală cu atenuarea γ_i .

Funcția pierderilor de energie $\text{Im}(-1/e)$ se redă prin formula:

$$\text{Im}\left(-\frac{1}{e}\right) = \sum_i^k \frac{(e_\infty^{-1} - e_0^{-1}) w_{LO_i}^2 g_i}{[(w_{LO_i} - w^2) + g_i^2 w^2]}. \quad (7)$$

Funcția $\text{Im}(-1/\varepsilon)$, după cum s-a menționat în [2, 6], are maximum la frecvențele fononilor optici longitudinali ω_{LO_i} , spre deosebire de funcția $e'(w)$ care trece în zero la frecvențele acelorași fononi LO, distingîndu-se de asemenea și de funcția $e''(w)$ ce are maximum la frecvențele fononilor optici transversali ω_{TO_i} .

În cazul compușilor complecși, cum sunt, de exemplu, $\text{Zn}_x\text{In}_2\text{S}_{3+x}$, permitivitatea $\varepsilon(\omega)$ are cîteva particularități de rezonanță și pentru fiecare dintre ele se poate deduce constanta de forță a vibratorului $f_i = \frac{e_0 - e_\infty}{4p}$ care s-a determinat din expresia:

$$f_i = \frac{\text{Im}[e(w_{TO_i})]}{w_{TO_i}} \cdot g_i. \quad (8)$$

Frecvențele și constantele de forță ale vibratorilor pentru vibrațiile optice longitudinale au fost determinate, de asemenea, din funcția pierderilor de energie $\text{Im}(-1/\varepsilon)$.

Probele studiate aveau formă de lamele stratificate transparente cu grosimile 80, 150, 330 μm și aria suprafeței $8 \times 12 \text{ mm}^2$ perpendiculară pe axa C. Spectrele de reflexie în domeniul frecvențelor $450 \div 5000 \text{ cm}^{-1}$ au fost ridicate la instalația "Hitaci-225", în domeniul frecvențelor $120 \div 500 \text{ cm}^{-1}$ cu spectrometrul pentru lungimi de undă lungi în infraroșu, înzestrat cu dispozitiv

de înregistrare automată a spectrelor, iar în domeniul frecvențelor $20 \div 120 \text{ cm}^{-1}$ cu spectrometrul ФИС-21.

Interpretarea rezultatelor experimentale

Compusul ZnIn_2S_4 a fost studiat prin metoda spectroscopiei în IR în lucrările [5, 6]. Ulterior, s-au cercetat detaliat spectrele pentru toți trei compușii din această familie a sulfizilor ternari ($x=1; 2; 3$) [7]. Mai târziu, rezultatele unor cercetări similare au fost publicate în lucrările [8, 9].

Măsurătorile spectrelor de transmisie și de reflexie a monocristalelor s-au efectuat în lumină polarizată ($\vec{E} \perp \vec{C}$), în temeii, la temperatura 300 K. Spectrele de reflexie au fost etalonate în raport cu reflexia oglinzii de aluminiu, gradul ei de reflexie fiind considerat egal cu 100%, iar etalonarea spectrelor de transmisie s-a efectuat conform transmisiei cadrului de suport al probei, a cărei ferestruică coincidea, în privința formei și a dimensiunilor, cu cele ale eșantionului studiat. Puterea de rezoluție a spectrometrului în tot diapazonul de măsurători a constituit 2 cm^{-1} .

Din spectrele de reflexie în domeniul frecvențelor $100 \div 600 \text{ cm}^{-1}$, în rezultatul aplicării metodei de analiză modificată Kramers-Krönig, au fost obținute dependența de frecvență a permitivităților dielectrice prezentate în fig. 1 (curbele 1 și 2). În afară de componentele (ϵ') și (ϵ''), informație veridică despre interacțiunea fononică în compusul semiconductor poate fi obținută și din analiza grafică a funcției pierderilor de energie a vibratorilor $\text{Im}(-1/\epsilon)$ (curba 3), calculată pe baza constantelor optice n și k și din dependența coeficienților de refracție și extincție de frecvență.

$$\text{Im}\left(-\frac{1}{\epsilon}\right) = 2nk(n^2 + k^2)^{-2} \quad (9)$$

Pentru ZnIn_2S_4 , frecvențele fononilor transversali $\omega_{\text{TO}i}$ s-au determinat după poziția maximurilor $\epsilon''(\omega)$, iar frecvențele fononilor longitudinali $\omega_{\text{LO}i}$ și constanta de atenuare γ - după maximurile funcției $\text{Im}(-1/\epsilon)$ (fig. 1, curba 3).

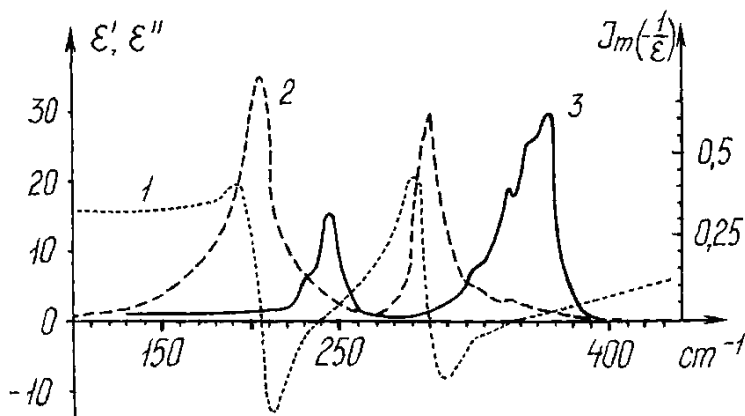


Fig. 1. Dependențele de frecvență a permitivităților dielectrice: 1 - $\epsilon'(\omega)$; 2 - $\epsilon''(\omega)$; 3 - $\text{Im}(-1/\epsilon)$ la compusul ZnIn_2S_4

Conform funcției $\varepsilon(\omega)$, vibrațiile în spectrele IR pot fi calificate drept vibrații de tipul A_1 . Referitor la vibrațiile transversale în domeniul frecvențelor $200 \div 300 \text{ cm}^{-1}$, constatăm că cele mai mari valori ale constantei de forță a vibratorului se obțin la frecvențele 204 și 299 cm^{-1} și anume $4,0$ și $2,6$ respectiv; celelalte au valoarea mică a constantei de forță $f \leq 0,3$ ($0,3$ pentru frecvența 232 cm^{-1}) și contribuția lor la valoarea permitivității dielectrice $\varepsilon(\omega)$ a cristalului este neînsemnată. Pentru frecvențele menționate, valorile constantei de atenuare γ a vibratorului, egale cu valoarea inversă a timpului de viață a fononilor, sînt egale respectiv cu 21 , 18 și 25 , iar pentru $\omega_{LO} = 244 \text{ cm}^{-1}$ valoarea ei este egală cu 13 . Pentru $x=2$ și $x=3$, constantele de forță au fost calculate și prezentate în lucrarea [11].

Valoarea permitivității dielectrice pentru frecvențe înalte ε_∞ poate fi obținută din relația:

$$\varepsilon_\infty = \left(\frac{r+1}{r-1} \right)^2, \quad (10)$$

unde r - coeficientul Fresnel de reflexie a luminii, care depinde de proprietatea de reflexie a lamelei monocristaline cu suprafețele plan paralele în domeniul ei de transparență, descrisă de relația:

$$R = \frac{2r^2}{1+r^2}. \quad (11)$$

Deoarece pentru frecvențele din domeniul $3000 \div 5000 \text{ cm}^{-1}$, $R=0,3$, obținem $\varepsilon_\infty=6,0$. Putem reda relația Lidden-Sachs-Teller în forma:

$$\left(\frac{w_{LOj}}{w_{TOj}} \right)^2 = \frac{e_\infty + \sum_i f_i}{e_\infty}, \quad (12)$$

unde f_i - constanta de forță a vibratorului i ($i=6-j$). Vom determina frecvența fononilor longitudinali ω_{LOj} ce corespund fononilor transversali ai vibrațiilor ω_{TOj} , luînd în considerație faptul că poate fi supusă analizei constanta ε_∞ și că în toate spectrele IR vibrațiile sînt de tipul A_1 .

Valorile constantelor ε_0 și ε_∞ pentru toți trei compușii $x=1$; 2 și 3 sînt prezentate în tabelul 1:

Valorile constantelor ε_0 și ε_∞		
ZnIn_2S_4	$\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$	$\text{Zn}_3\text{In}_3\text{S}_6$
$\varepsilon_0=12,6$	$\varepsilon_0=12,32$	$\varepsilon_0=16,96$
$\varepsilon_\infty=6,0$	$\varepsilon_\infty=6,0$	$\varepsilon_\infty=6,0$

Forța mică a vibratorilor (absorbție slabă) în cazul vibrațiilor de frecvență joasă impun supoziția că ele sînt condiționate de vibrațiile dure ale pachetelor straturilor unul față de altul și că astfel de pachete în celula elementară sînt nu mai puțin de două.

La baza structurii cristaline a cristalului ZnIn_2S_4 se află pachetul cu patru straturi cu împachetarea compactă a atomilor de sulf în ale cărui goluri sînt

situați atomii de Zn și In (Fig. 2). Structura cristalelor $Zn_2In_2S_5$ este descrisă de pachetul cu cinci straturi de atomi de sulf compact împachetate, ale cărei goluri tetraedrice și octaedrice sînt ocupate de cître doi atomi de Zn și doi atomi de In. Analogic celor doi compuși precedenți, cristalele de $Zn_3In_2S_6$ reprezintă lamele stratificate la baza structurii cărora se află pachetul constituit din șase straturi de atomi de sulf cu împachetare hexagonală. Un atom de In completează golurile octaedrice între straturile trei și patru ale atomilor de sulf. Trei atomi de Zn și un atom de In completează golurile tetraedrice în diferite straturi ale atomilor de sulf.

Legăturile interatomice în compușii complecși au moduri de vibrație cu frecvențe foarte joase, de regulă sub 400 cm^{-1} , ce pot fi evaluate numai prin spectroscopia interferențială.

Cunoașterea acestor frecvențe este importantă pentru caracterizarea structurală a compușilor. După cum se știe, modurile de vibrație ale unui cristal în centrul zonei Brillouin (vectorul de undă $k=0$) oferă informația necesară pentru elucidarea unor aspecte cum ar fi intensitatea și natura interacțiunilor în interiorul straturilor sau interacțiunii dintre straturilor. Din spectrele de transmisie și de reflexie ale compusului $ZnIn_2S_4$ în domeniul frecvențelor joase ale spectrului au fost obținute următoarele frecvențe, ce au constanta de forță a vibratorului mică: $f_i: 41, 75$ și 83 cm^{-1} . Din aceste trei vibrații cea mai mare valoare a constantei de forță o posedă vibratorul cu frecvența 41 cm^{-1} . În rezultatul comparării spectrelor diferitor eșantioane se poate concluziona că benzile de absorbție la frecvențele 180 și 230 cm^{-1} sînt condiționate de defectele rețelei cristaline. Din tabloul de interferență [7] în lamela $ZnIn_2S_4$ poate fi obținută valoarea exactă a permitivității dielectrice statice ϵ_0 a cristalului, deoarece $\epsilon_0 = [10^4 / (2dDn)]^2$, unde d – grosimea lamelei în μm , iar Δv este distanța dintre maximele benzilor de interferență vecine exprimată în cm^{-1} . În acest mod, constanta dielectrică statică ϵ_0 are valoarea $\epsilon_0 = 12,6 \pm 0,3$, fapt care este în concordanță cu valorile ei, calculate din spectrele de reflexie în domeniul benzilor razelor remanente. Într-adevăr, deoarece $\epsilon_0 = \epsilon_\infty + \sum f_i$, unde f_i este constanta de forță a vibratorilor fononilor transversali, iar ϵ_∞ - constanta dielectrică la frecvențe înalte care s-au determinat în mod similar din tabloul de interferență în domeniul $\sim 1000\text{ cm}^{-1}$ obținem: $\epsilon_\infty = 6,0 \pm 0,2$; $\sum f_i = 6,9 \pm 0,3$.

În fig 2 sînt reprezentate spectrele IR de reflexie pentru toți cei trei compuși $ZnIn_2S_4$, $Zn_2In_2S_5$ și $Zn_3In_2S_6$ în domeniul spectral $40-400\text{ cm}^{-1}$ și fragmente ale împachetării atomilor în celulele elementare ale acestor compuși. Din figură se observă că spectrele compușilor $x=2$ și $x=3$ în domeniul frecvențelor înalte ale spectrului în principiu repetă spectrul compusului $ZnIn_2S_4$. În acest domeniu al spectrului se disting frecvențele 310 (TO) și 368 (LO) în $ZnIn_2S_4$, 305 (TO) și 363 (LO) în $Zn_2In_2S_5$ și 306 (TO) și 363 cm^{-1} (LO) în $Zn_3In_2S_6$. Această particularitate comună pentru toți compușii ($x=1, 2, 3$) este condiționată de vibrațiile S-S. În compușii $Zn_2In_2S_4$ și $Zn_3In_2S_6$ apare, în comparație cu $ZnIn_2S_4$, doar un fonon

transversal suplimentar cu frecvența 250 cm^{-1} (E_{TO}). Acestui fonon transversal îi corespunde fononul longitudinal cu frecvența 270 cm^{-1} (E_{LO}). O coincidență similară a vibrațiilor de frecvență înaltă s-a observat și în spectrele de împrăștiere Raman pentru compușii $x=2$ și $x=3$, care, la rândul, lor sînt condiționate de legăturile intermoleculare In-S. În domeniul lungimilor de undă lungi în ZnIn_2S_4 se manifestă vibratorii puternici la frecvența 204 (TO) și 244 cm^{-1} (LO), în $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ – 205 (TO) și 236 (LO), iar în $\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ – 208 (TO) și 240 cm^{-1} (LO), care sînt, de asemenea, condiționați de legăturile In-S din tetraedre. În spectrele compusului $\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ vibratorii se manifestă la frecvențele 165 cm^{-1} (TO) și 168 cm^{-1} (LO) care se evidențiază slab în compușii $x=1$ și $x=2$. Aceste vibrații, ca și cele menționate mai sus, sînt cauzate de legăturile In-S. O astfel de coincidență a spectrelor sau asemănarea lor în domeniul spectral $170\div 400\text{ cm}^{-1}$ s-a constatat și în spectrele Raman. Această coincidență demonstrează faptul că în interiorul straturilor vibrațiile sînt identice și este identic, de asemenea, caracterul legăturilor dintre atomi, iar compușii sînt izostructurali.

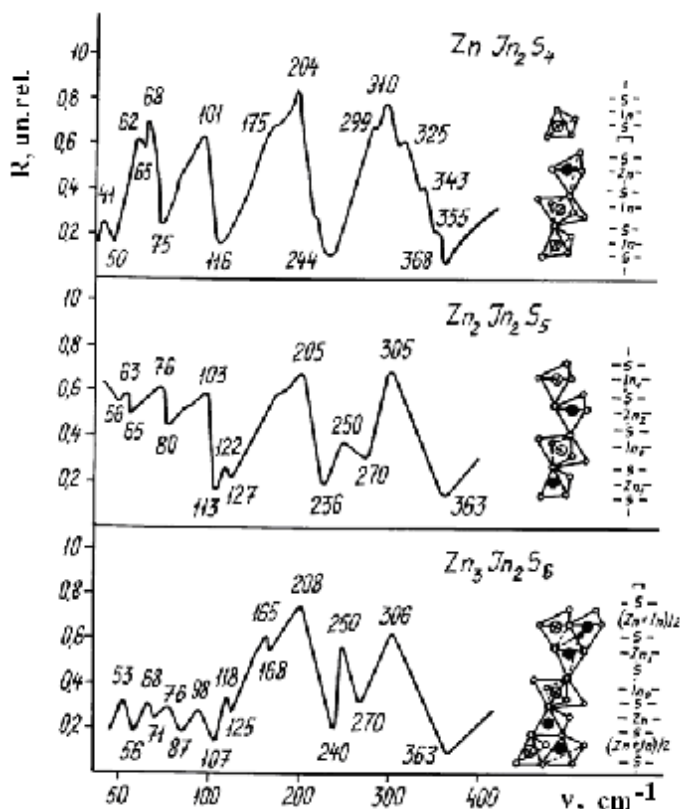


Fig. 2 Spectrele de reflexie ale cristalelor $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_4$, $\text{Zn}_2\text{In}_2\text{S}_5$ și $\text{Zn}_3\text{In}_2\text{S}_6$ în lumină S polarizată și fragmente ale împachetării atomilor în celulele elementare.

Concluzii

Au fost cercetate spectrele în IR ale monocristalelor $Zn_xIn_2S_{3+x}$. Din dependența spectrală a coeficientului de reflexie au fost identificate modurile condiționate de vibrațiile fundamentale ale rețelei cristaline (pentru $x=1; 2; 3$). S-au depistat dispersia componentei reale (ϵ') și a celei imaginare (ϵ'') a constantei dielectrice și a funcției pierderilor de energie $Im(-1/\epsilon)$ în dependență de frecvență. Au fost determinate constantele optice principale pentru $x=1$, constantele dielectrice de înaltă frecvență ($\epsilon_\infty=6$) și cele statice ($\epsilon_0=12,6$). S-a stabilit că spectrele de reflexie în domeniul spectral $170\div 400\text{ cm}^{-1}$ a compușilor studiați coincid calitativ. Din analiza spectrelor de reflexie în IR a compusului $x=1$ au fost determinate modurile active ale vibrațiilor.

Bibliografie

1. Romeo, N., Dallaturca, A., Braglia R., Sbervegliere, G. *Charge Storage in ZnIn₂S₄ Single Crystals*. // Appl. Phys. Lett., 1973, v.22, N.1, p. 21-22.
2. Merten, L. *Über die vitterschwingungen in kristallen mit wiatzitstruktur*, // Zeit.Naturforsch, 1962, 17a, N.1, p. 65-85.
3. Neuberger, J., Hatcher, R.. *Infrared Optical Constants of NaCl⁺*. // J. Chem. Phys., 1967, v.34, N. 3, p. 1733-1743.
4. Zalen, R., Slade, L.M., Vond, A.T. *Lattice Vibrations and Interlayer Interactions in Crystalline As₂S₃ and As₂Se₃* // Phys. Rev. (b), 1971, v. 3, N. 12, p. 4257-4273.
5. Арама, Е.Д., Виноградов, Е.А., Жижин, Г.Н., Житарь, В.Ф., Мельник, Н.Н. *Оптические фононы в монокристаллах ZnIn₂S₄* // Всесоюзная Конференция "Тройные Полупроводники и их Применение", Кишинев, Штиинца, 1976. с. 159-160.
6. Арама, Е.Д., Виноградов, Е.А., Жижин, Г.Н., Житарь, В.Ф., Мельник, Н.Н., Радауцан, С.И.. *Колебательный спектр кристаллической решетки ZnIn₂S₄*. // Доклады АН СССР, 1976, т. 231, № 6, с. 1143-1146.
7. Арама, Е.Д., Виноградов, Е.А., Жижин, Г.Н., Житарь, В.Ф., Бурлаков, В.М., Радауцан, С.И.. *Исследование монокристаллов ZnIn₂S₄ и Zn₃In₂S₆ методом длиноволновой ИК спектроскопии*. // Изв. АН МССР, Серия физико-технических и математических наук, Кишинев, 1979, № 1, с. 31-36.
8. Радауцан, С.И., Сырбу, Н.Н., Левин, В.Э., Доника, Ф.Г. *Колебательные спектры кристаллической решетки политипов соединений Zn_mIn₂S_{3+m}*. // Физика и техника полупроводников, 1990, т. 24, № 9, с. 1952-1957.
9. Жижин, Г. Н. и др. *Оптические колебательные спектры кристаллов*. Москва, Физико-математическая литература, 1984, 350 с.

10. Блинов, А.М., Виноградов, Е.А., Мотачун, А.Т. *Метод модифицированного анализа Крамерса-Кронига*. // Препринт ФИАН СССР, 1974, № 59.
11. Сырбу, Н. Н., Тезлеван, В. Е., Клотц, К., Крецу, Р. В. *Электронные и колебательные спектры в кристаллах $MgIn_2S_4$ и $ZnIn_2S_4$* . // Оптика и спектроскопия, Москва, 1997, т. 82, № 4, с. 586–592.

THE VIBRATIONAL INFRARED SPECTRA OF CRYSTALLINE STRUCTURE OF SEMICONDUCTOR COMPOUNDS $Zn_xIn_2S_{3+x}$

Efim Arama

(State University of Medicine and Pharmacy “Nicolae Testemițanu”)

The reflection spectra of monocrystals $ZnIn_2S_4$, $Zn_2In_2S_5$, $Zn_3In_2S_6$ are studied in the infrared range of spectrum and vibrations are interpreted regarding the symmetry of crystals. Both longitudinal and transversal components of the division of photons and the duration of existence of phonons and vibrators forces are studied. The peculiarities that are manifested in the vibration spectra of reflection are explained by different structural positions that are occupied by atoms of Zn and In in the holes of tetrahedral and octahedral packaging in all the mentioned compounds.

Prezentat la redacție la 14.12.06

C.Z.U.538.9

Efecte optice în bicristalele aliajelor $Bi_{1-x}Sb_x$ ($0,06 \leq x \leq 0,20$)

Andrian Gheorghță, Igor Postolachi (Universitatea de Stat din Tiraspol)

Mihai Caraman (Universitatea de Stat din Moldova)

Sînt prezentate rezultatele studiului experimental al efectelor optice în monocristale și bicristale $Bi_{1-x}Sb_x$ ($0,06 \leq x \leq 0,20$) pentru diapazonul spectral (1-6) eV. Comparîndu-se spectrele optice ridicate de la suprafețele monocristalelor și bicristalelor cu aceeași compoziție, se evidențiază un șir de particularități cauzate de influența suprafeței de delimitare a cristalelor cu diferite unghiuri de deorientare.

Introducere

Performanțele recente ale fizicii stării condensate se datorează extinderii semnificative a studiului proprietăților fizice și structurii spectrului energetic a diferitor materiale. Ele sînt determinate de faptul că în corpurile solide de o anumită structură sînt puse în evidență un șir de efecte specifice, datorită cărora aceste materiale sînt extrem de solicitate în tehnica contemporană. Se profilează vaste posibilități de implementare a diferitor materiale semiconductoare în energetica contemporană și fotonica modernă. Cerințele microelectronicii nu mai pot fi satisfăcute doar prin modernizarea procedeele tehnologice de confecționare a dispozitivelor electronice și fotonice, fără a evidenția modificările spectrului de

caracteristici sub influența diferitor sisteme de defecte structurale și dislocații, precum și fără a ilucida legitățile fizice de interacțiune a purtătorilor de sarcină (electroni, gouri), a purtătorilor elementari de informație (fotoni).

Un loc deosebit, în această ordine de idei, aparține bicristalelor, tricristalelor cu diferite suprafețe de delimitare. Restructurarea spectrului energetic sub influența suprafețelor de delimitare a cristalitelor în bicristale prezintă interes atât sub aspect teoretic, cât și aplicativ în cazul concret al studierii diferitor probleme ale fizicii și ingineriei contemporane, cum ar fi supraconductibilitatea planurilor de maclare la metale, simetria stării de cuplare în supraconductori la temperaturi înalte, restructurarea suprafeței Fermi etc.

Fiind un defect intern bidimensional, suprafața de delimitare desparte două faze fizice cristaline echivalente. În acest sens, o importanță deosebită prezintă cercetarea caracterului interacțiunii purtătorilor de sarcină și de informație cu suprafața de delimitare a cristalitelor. Interacțiunea purtătorilor de sarcină cu suprafața de delimitare a cristalitelor modifică spectrul energetic.

Particularitățile modificării spectrului energetic al purtătorilor de sarcină sub influența suprafeței de delimitare a cristalitelor pot fi evidențiate experimental numai în cazul când se cunoaște cu o exactitate destul de mare structura energetică a componentelor integrale ce formează bicristalul. Acestor cerințe le corespund aliajele $Bi_{1-x}Sb_x$.

Prezenta lucrare reflectă rezultatele studierii efectelor de modificare a structurii spectrelor energetice a purtătorilor de sarcină sub influența suprafeței de delimitare în bicristale de $Bi_{1-x}Sb_x$ ($0,06 \leq x \leq 0,20$).

Aliajele $Bi_{1-x}Sb_x$ în formă monocristalină sînt studiate destul de detaliat [1].

În studiile existente [2,3] se analizează rezultatele influenței suprafeței de delimitare asupra spectrului energetic al purtătorilor de sarcină în bicristale de $Bi_{1-x}Sb_x$ în apropierea suprafeței Fermi (diapazonul energetic \sim meV) în baza studiului efectelor cuantice oscilatorii.

Modificarea constantelor optice sub influența suprafeței de delimitare în bicristale din $Bi_{1-x}Sb_x$ pentru diapazonul spectral (1-6)eV sînt supuse studiului pentru prima oară.

Rezultatele experimentale și discuția lor

Problema studierii particularităților proprietăților fizice ale diferitor bicristale este descrisă detaliat în monografia [5]. S-au studiat efectele optice ale bicristalelor aliajelor $Bi_{1-x}Sb_x$ ($0,06 \leq x \leq 0,20$) pentru diferite suprafețe de delimitare a cristalitelor și diferite conductivități electrice.

Eșantioanele studiate în această lucrare au fost preparate prin metoda topirii zonale, utilizîndu-se tehnica agentului dublu de cristalizare. Topirea și cristalizarea zonală este cea mai reușită metodă tehnologică de creștere a monocristalelor $Bi_{1-x}Sb_x$, dat fiind faptul că permite obținerea de structuri omogene pe integralul cristal. Tehnologia de obținere a monocristalelor $Bi_{1-x}Sb_x$ este descrisă în multiple lucrări [4], iar tehnologia de preparare a bicristalelor este prezentată în [5]. Diferite

conductivităţii electrice ale bicristalelor studiate s-au obţinut dopînd în timpul topirii zonale cu telur (n-tip de conducţie) şi cu staniu (p-tip de conducţie). S-au studiat bicristale $Bi_{1-x}Sb_x$ cu suprafeţe de delimitare a cristalitelor de tip înclinare şi tip torsiune. Tipul suprafeţei de delimitare este determinat de geometria structurală a bicristalelor. Geometria structurală a bicristalelor şi orientarea suprafeţei de delimitare a cristalitelor în spaţiul reţelei cristaline este reprezentată în fig. 1.

Pentru descrierea structurii bicristalelor sînt necesari cinci parametri unghiulari independenţi: trei parametri care determină orientarea cristalitului II faţă de cristalitul I şi doi parametri unghiulari care determină orientarea suprafeţei de delimitare a cristalitelor. Dacă axa de rotaţie a unui cristalit se află în planul suprafeţei cristalitelor, avem o suprafaţă de delimitare de înclinare. Structura unei astfel de suprafaţe este reprezentată în fig.1(a,b). Dacă axa de rotaţie este perpendiculară suprafeţei de delimitare a cristalitelor, avem o suprafaţă de torsiune. Structura suprafeţei de delimitare de torsiune este reprezentată în fig. 1(d,c).

Parametrii structurali (cum ar fi unghiul de dezorientare a cristalitelor şi orientarea planului interfeţei cristaline) au fost determinaţi prin metoda microscopiei electronice şi prin analiza structurală de raze X. Fiecare dintre aceste metode are avantajele şi dezavantajele ei.

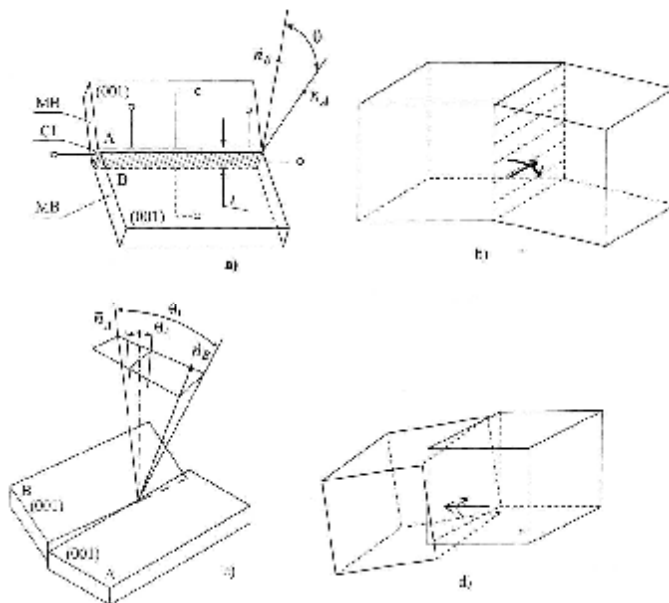


Fig. 1. Geometria structurală a bicristalelor $Bi_{1-x}Sb_x$. a, b – suprafaţa de delimitare de înclinare; c, d – suprafaţa de delimitare de torsiune; MB – monoblocuri cristaline; CI – interfaţa cristalină; θ , θ_1 , θ_2 – unghiuri de dezorientare a cristalitelor; \vec{n}_A , \vec{n}_B – versori la suprafeţele monoblocurilor respective.

Folosirea microscopiei electronice permite a observa defecţiunile şi imperfecţiunile structurii ideale a cristalului. Cu ajutorul acestei metode se poate observa doar imaginea bidimensională a obiectului cercetat, dar nu pot fi obţinute

informații despre structura atomică a cristalului. Descrierea detaliată a metodei microscopiei electronice este făcută în [6], iar metodele de aplicare a ei pentru cercetarea suprafeței de delimitare a cristalitelor este descrisă în [7]. O altă metodă de cercetare a structurii materialului este analiza structurală cu raze X, care este cea mai eficientă pentru studiul structurii periodice tridimensionale. Deși datele obținute au o exactitate înaltă, această metodă este mai complicată.

Se produce medierea imaginii pe toată structura și nu se poate obține o informație clară despre defecțiunile separate ale structurii cristaline. Din cele expuse rezultă că varianta optimă, aplicată în această lucrare, este folosirea complexă a metodei microscopiei electronice și analizei structurale cu raze X.

Spectrele optice au fost ridicate de la suprafețele obținute la despicarea lingoului monocristalin la temperatura de 300K folosindu-se lumină polarizată din domeniul spectral (0,4-50) μm . Unghiurile de dezorientare a cristalitelor variază în limitele $0,6-10^\circ$. Conform [5], bicristalele $Bi_{1-x}Sb_x$ ($0,06 \leq x \leq 0,20$) reprezintă cristalite cu unghiuri mici de dezorientare.

În fig.2 este prezentat spectrul de reflexie a monocristalului de $Bi_{0,88}Sb_{0,12}\langle\text{Te}\rangle$ ridicat la incidența fluxului sub unghiul de 8° . În același grafic este prezentată curba teoretică a dependenței $R = R(\mathbf{hw})$ calculată cu ajutorul următoarelor formule:

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (1)$$

$$n^2 - k^2 - 1 = \frac{Ne^2}{me_o} \cdot \frac{\omega_o^2 - \omega^2}{(\omega_o^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 g^2} \quad (2)$$

$$2nk = \frac{Ne^2}{me_o} \cdot \frac{\omega g}{(\omega_o^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 g^2}, \quad (3)$$

unde n - indicele de refracție; k - indicele de extincție; g - constanta de amortizare; ω - frecvența luminii incidente.

Din fig.2 se observă că, pentru domeniul energetic $\mathbf{hw} \geq 2,8eV$, curba teoretică calculată în cazul dispersiei clasice pentru semiconductorii puternic dopați este în bună concordanță cu dependența experimentală.

Totodată, pe alura curbei experimentale $R = R(\mathbf{hw})$, se observă un șir de particularități sub formă de maxim și prag, care pot fi identificate ca tranziții optice ale electronilor dintre benzile de valență și benzile de conducție. Pentru ca astfel de tranziții ale electronilor să se manifeste pe fundalul interacțiunii fotonilor cu purtătorii de sarcină liberi (linia segmentată), este necesar ca densitatea de stări ale electronilor din banda de conducție să fie excesivă, adică situată superior față de nivelul Fermi, pentru semiconductorii de tipul n (vezi montajul în fig.2).

Montajul (intersetul) prezintă diagrama tranzițiilor optice în apropierea punctelor critice Van Hove. Pozițiile energetice ale particularităților coeficientului de reflexie pentru monocristalul $n-Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ sînt prezentate în tabelul 1.

În fig.3 este prezentată dependența spectrală a funcției $e_2 E^2 = f(\mathbf{hw})$ calculată cu ajutorul relațiilor Cramers-Kroning din spectrele de reflexie (ϵ_2 - partea imaginară a permitivității dielectrice; E - energia fotonului). Pe conturul acestei dependențe se evidențiază clar maximele (A, C, D, E) cu energiile

respective: 2,1 eV; 4,35 eV; 5,4 eV; 5,7 eV. Particularitatea (B) cu maxim la 3,25 eV se manifestă ca o pantă localizată într-un domeniu larg de energii. Comparând rezultatele prezentate în aceste două figuri, conchidem că există o corelare satisfăcătoare pentru monocristalul studiat.

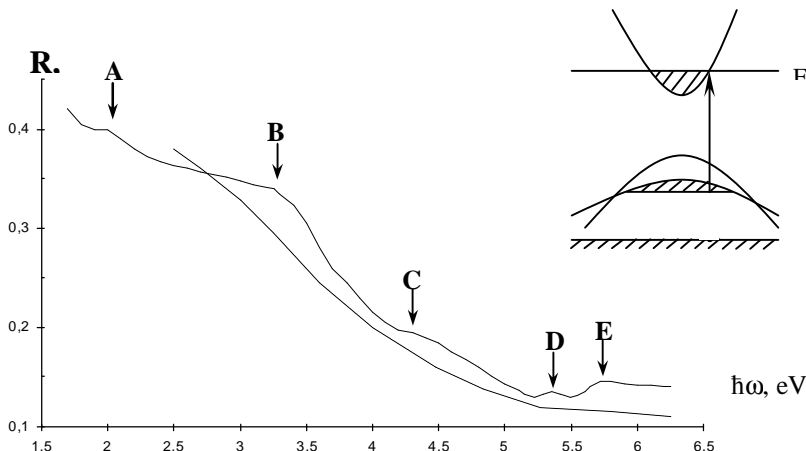


Fig.2. Spectrul de reflexie a $Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ la $T=300$ K.

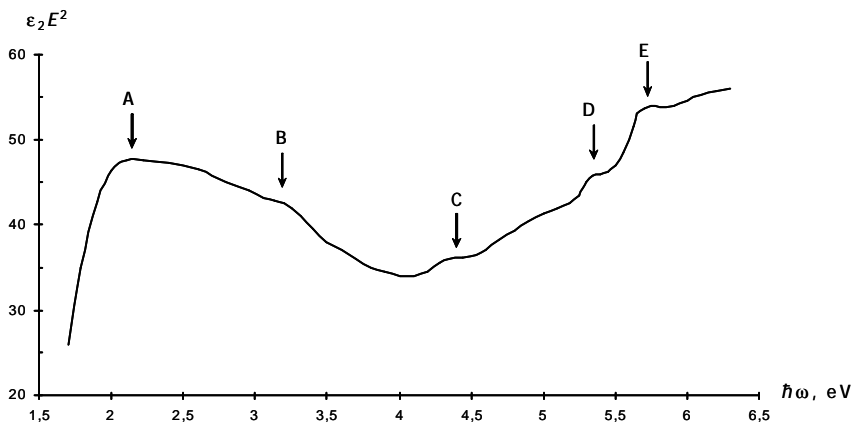


Fig.3. Dependența spectrală a permitivității dielectrice imaginare ϵ_2 în coordonatele funcției $\epsilon_2 E^2 = f(\hbar\omega)$ pentru $n-Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ la 300K.

Valoarea energiilor caracteristice pentru tranzițiile de rezonanță în bicristalele $n-Bi_{0,88}Sb_{0,12}$

Caracteristicile	Energia, eV				
	A	B	C	D	E
Reflexie (experiment)	2,0	3,25	4,30	5,35	5,70
$\epsilon_2(\hbar\omega)$ (calculat)	2,1	3,2	4,35	5,40	5,70
$\chi(\hbar\omega)$ (calculat)	2,1	3,10	4,38	5,40	5,75

În fig.4 este prezentată dependența spectrală a indicelui de absorbție $c = f(\hbar\omega)$. Mărimea acestui parametru este determinată, în primul rînd, de

tranzițiile electronice dintre benzile energetice complete și nivelurile libere din banda de conducție localizate mai sus de nivelul Fermi, cât și de absorbția luminii de către purtătorii de sarcină liberi.

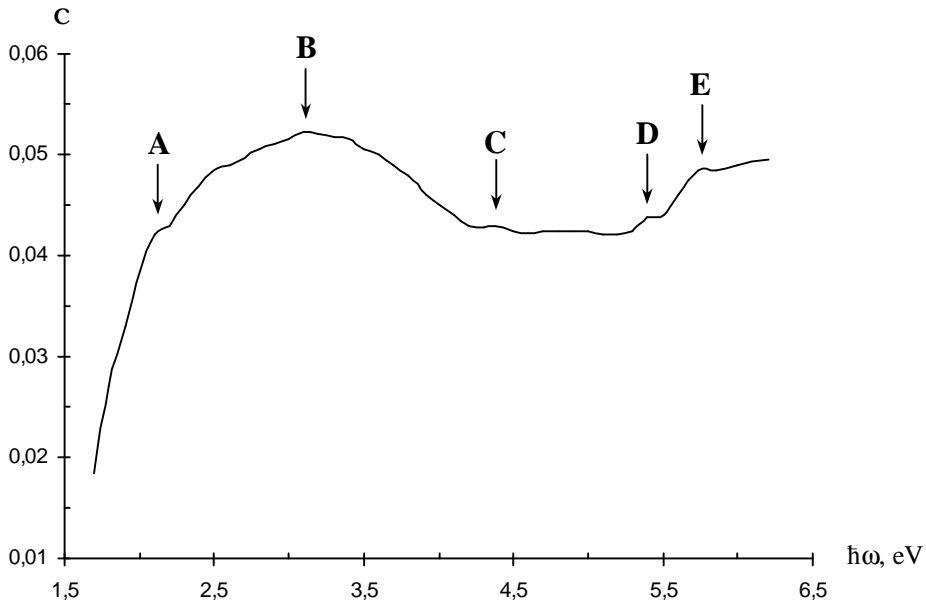


Fig. 4. Dependența spectrală a indicelui de absorbție $\chi(h\nu)$ pentru $Bi_{0,88}Sb_{0,12}$.

Totodată, pe conturul dependenței $c = f(h\nu)$, se evidențiază clar toate particularitățile (A, B, C, D, E), caracteristice pentru tranzițiile optice ale electronilor dintre benzi. Mărimile energiilor caracteristice pentru tranzițiile de rezonanță sînt prezentate în tabel.

Rezultatele bazate pe valoarea experimentală a funcției $R = R(h\nu)$ pentru un monocristal din $Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ în cazul în care $e_2 = e_2(h\nu)$; $e_2 E^2 = f(h\nu)$ și $\chi = \chi(h\nu)$, prezentate în figurile 2, 3, 4 și tabelul 1, confirmă o corelație satisfăcătoare.

Pentru a stabili modul în care se prezintă particularitățile funcției $R = R(h\nu)$ în bicristale aliajelor $Bi_{1-x}Sb_x$ cu aceeași compoziție, spectrele de reflexie au fost deplasate, folosindu-se tehnici modulaționale.

În fig.5(a, b, c, d, e), sînt prezentate dependențele spectrale $\frac{\Delta R}{RVI} = f(h\nu)$. Elementul de suprafață iluminat are aria de $(0,2 \times 3) \text{ mm}^2$ și conține frontiera de separație a cristalitelor din bicristalul n- $Bi_{0,88}Sb_{0,12}$.

Dependența $\frac{\Delta R}{RVI} = f(h\nu)$ reflectă un șir de particularități determinate de structura benzilor energetice în bicristalele $Bi_{1-x}Sb_x$ și, în particular, aportul joncțiunii bicristalelor în modificarea funcțiilor optice prin intermediul cîmpului electric local și a cîmpului deformațional. Pe dependența $\frac{\Delta R}{RVI} = f(h\nu)$, se pun în evidență două tipuri de particularități: simple și complexe. Dependențele formate din curbe simple pot fi observate și în vecinătatea punctelor B ($h\nu = 3,2 \text{ eV}$) și

$E(\hbar\omega = 5,7eV)$, iar dependențele formate din curbe complexe - în vecinătatea punctelor $A(\hbar\omega = 2,0eV)$, $C(\hbar\omega = 4,3eV)$ și $D(\hbar\omega = 5,2eV)$. Prin urmare, câmpurile de deformare și electric, generate în bicristalul $Bi_{1-x}Sb_x$, modifică structura benzilor electronice doar în vecinătatea particularităților $A(\hbar\omega = 2,0eV)$, $C(\hbar\omega = 4,3eV)$ și $D(\hbar\omega = 5,2eV)$.

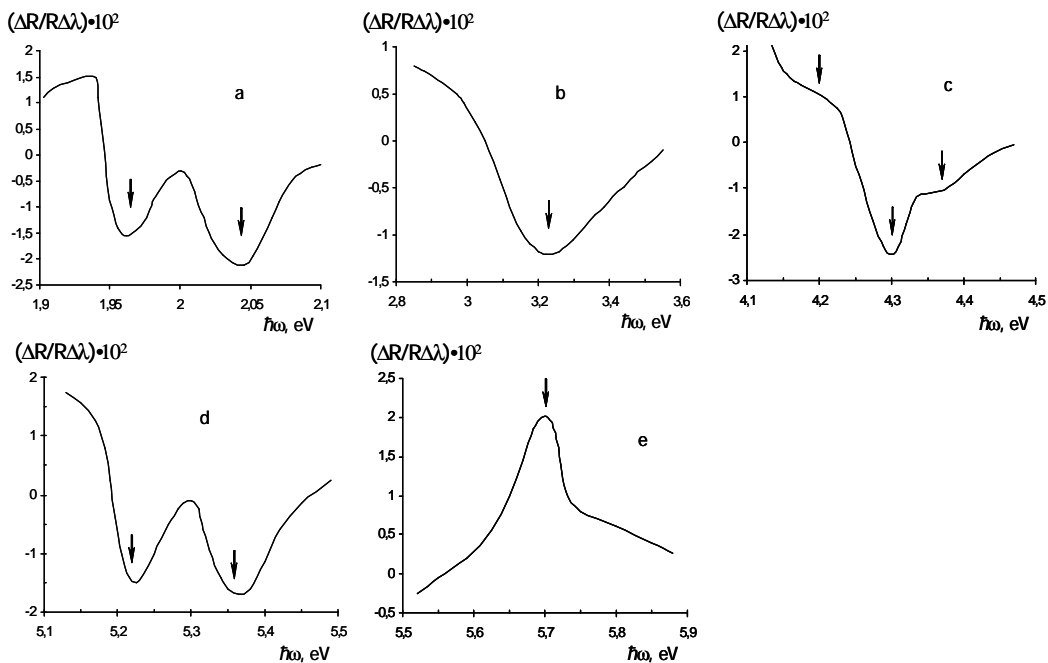


Fig. 5. Dependența spectrală a funcției $\frac{\Delta R}{R\Delta\lambda}$ pentru bicristalul de $n-Bi_{0,88}Sb_{0,12}$ la temperatura $300K$ în regiunea particularităților (A, B, C, D, E) evidențiate în fig.3.

În baza comparării spectrelor optice în monocristale și bicristale, conchidem că prezența perturbațiilor deformaționale și electrostatice generate în bicristale duc la majorarea lățimii benzii interzise cu $\sim 75 meV$, $\sim 60 meV$, $\sim 150 meV$ în vecinătatea particularităților A, C și D. Dependențele formate din curbe complexe pot fi observate în vecinătatea punctelor $A(\hbar\omega = 2,0eV)$, $C(\hbar\omega = 4,3eV)$ și $D(\hbar\omega = 5,2eV)$. Prin urmare, câmpurile de deformare și electric, generate în bicristalul $Bi_{1-x}Sb_x$, modifică structura benzilor electronice doar în vecinătatea particularităților $A(\hbar\omega = 2,0eV)$, $C(\hbar\omega = 4,3eV)$ și $D(\hbar\omega = 5,2eV)$.

Particularitățile efectelor optice discutate mai sus nu depind de componența aliajului.

Concluzii

Bicristalele studiate posedă proprietăți de semiconductori cu lărgimea îngustă a benzii energetice interzise. În baza comparației efectelor optice ale

monocristalelor și bicristalelor cu aceeași compoziție, s-au determinat modificările spectrului energetic al purtătorilor de sarcină sub influența suprafeței de delimitare a cristalitelor. Particularitățile evidențiate sînt cauzate de cîmpurile deformațional și electrostatic, generate de suprafața de delimitare a cristalitelor. Experimental, s-a stabilit că modificarea constantelor optice în bicristale depinde de tipul suprafeței de delimitare și valorile unghiurilor de dezorientare.

Bibliografie

1. Гицу, Д.В., Голбан, И.М., Канцер, В.Г., Мунтяну, Ф.М.. *Явления переноса в висмуте и его сплавах*, Кишинев, Штиинца, 1983.
2. Мунтеану, Ф.М., Дубковецкий, Ю.А., Гилевски, А. *Квантовые осцилляции холловского сопротивления висмута с малоугловыми внутренними границы кручения* // Физика Твёрдого Тела, 2004, т.46, №.10, с. 1763-1766.
Munteanu, F., Onu, M., Chistol, V., Dubkovetski, Iu., Gheorghitsa, A. *Quantum Oscillations of the Hall Resistance in Small-Angle Bicrystals of Bismuth* // Fifth General Conference of the Balkan Physical Union, August 25-29, Vrnjacka Banja, Serbia and Montenegro, 2003, p.763-766.
3. Ону, М. И. *Зонная структура и особенности явлений переноса в сплавах ($0 \leq x \leq 0,7$) при низких температурах. Диссертация кандидата физико-математических наук*, Кишинев, 1983, 133 с.
4. Мунтяну, Ф. М.. *Явления переноса в полуметаллах VB группы и их сплавах в сильных магнитных полях. Докторская диссертация*, Кишинэу, 1987, 432 с.
5. Матаре, Г. *Электроника дефектов в проводниках*, Москва, Мир, 1974, 463 с.
6. Вайнштейн, Б. К.. *Электронная микроскопия атомного разрешения*, Ухпехи физических наук, 1987, т. 152, № 1, с. 75 – 122.
7. Валиев, Р.З., Вергазов, А.Н., Герцман, В.Ю.. *Кристаллогеометрический анализ межкристаллитных границ*, Москва, Наука, 1991, 232 с.

OPTIC EFFECTS IN THE BICRISTALS OF $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ($0,06 \leq x \leq 0,20$) ALLOYS

Andrian Georgetse, Igor Postolaki (State University of Tiraspol)
Mihail Karaman (State University of Moldova)

The following work presents the results of the experimental study of optic effect in $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ ($0,06 \leq x \leq 0,20$) monocristals and bicrystals for the (1-6) eV spectral pitch. Comparing the optic specters risen from the surfaces of the monocristals and bicrystals of the same composition, a range

of features caused by the influence of the delimitation surface of cristals with different loss angles were emphasized.

Prezentat la redacție la 17.12.06

CZU: 538.9

TRANSMISIA OPTICĂ ÎN STRATURILE SUBȚIRI DE ZnSe

Mihail Popa (Universitatea de Stat „Alecu Russo”, Republica Moldova)

Gheorghe Ioan Rusu (Universitatea „Al. I. Cuza”, România)

Spectrele de transmisie optică pentru straturile subțiri de ZnSe au fost obținute în domeniul spectral 330-1400nm. Prezența maximelor și minimelor de interferență în spectrele de transmisie sînt datorate reflexiilor multiple de pe suprafața stratului și reprezintă un indiciu că probele sînt uniforme și că suprafețele straturilor sînt plane.

Odată cu creșterea grosimii straturilor, crește și numărul maximelor și minimelor de interferență, iar pentru grosimi $d > 0.77\mu\text{m}$ diferența dintre transmisia maximă și minimă se micșorează.

Introducere

În fizica stării condensate se cercetează fenomenele fizice ce se produc la interacțiunea radiațiilor electromagnetice cu corpurile cristaline. Un interes deosebit prezintă reflexia, refracția, absorbția și transmisia radiațiilor electromagnetice în straturile subțiri policristaline.

Studiul spectrelor de transmisie ale straturilor subțiri poate oferi concluzii importante referitoare la structura, compoziția și proprietățile fizico-chimice ale substanțelor semiconductoare.

Scopul acestei lucrări este de a analiza evoluția spectrelor de transmisie ale straturilor subțiri de ZnSe în funcție de grosimea lor.

Considerații teoretice

Cînd un fascicul de lumină monocromatică trece printr-un strat subțire, intensitatea sa scade atît datorită reflexiei la suprafața stratului, cît și absorbției luminii în strat (fig. 1) [1].

Dacă J_0 reprezintă intensitatea luminii incidente, J_R – intensitatea luminii reflectate, J_T – intensitatea luminii transmise, iar J_A – intensitatea luminii absorbite, atunci, în acord cu legea conservării energiei, există o relație evidentă

$$\frac{J_R}{J_0} + \frac{J_T}{J_0} + \frac{J_A}{J_0} = 1, \quad (1)$$

sau

$$R + T + A = 1, \quad (2)$$

unde R reprezintă coeficientul de reflexie, T este coeficientul de transmisie, iar A – fracțiunea de lumină absorbită.

Pe măsură ce fasciculul de lumină străbate stratul subțire, intensitatea luminoasă scade, după parcurgerea distanței dx, cu valoarea dJ. Această variație (scădere) va fi, evident, proporțională cu grosimea dx, precum și cu intensitatea luminoasă în punctul x, adică [1, 2]:

$$-dJ = aJdx. \quad (3)$$

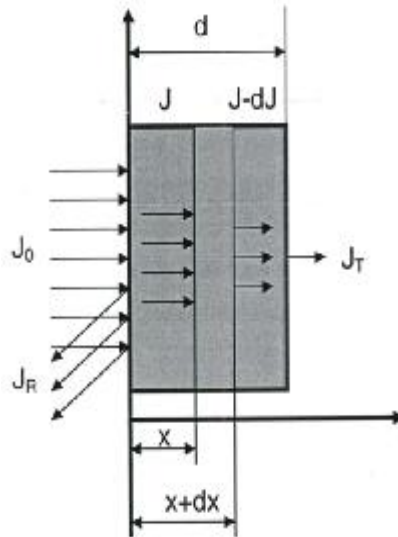


Fig. 1. Variația intensității luminii.

Integrând această relație se obține:

$$\int_{J_0}^J \frac{dJ}{J} = - \int_0^d \alpha dx, \tag{4}$$

de unde

$$J = J_0 e^{-\alpha d} = J_0 e^{-\frac{d}{L_\lambda}}, \tag{5}$$

în care $L_\lambda = \frac{1}{\alpha}$ este lungimea de absorbție, iar d – grosimea stratului.

Dacă se ține seama de reflexia la suprafața stratului, atunci, în loc de J_0 , se va lua $J_0(1 - R)$ și relația (4) se scrie sub forma

$$\int_{J_0(1-R)}^J \frac{dJ}{J} = - \int_0^d \alpha dx, \tag{6}$$

și deci legea de absorbție a luminii devine [1, 2]

$$J(d) = J_0(1 - R) e^{-\alpha d}. \tag{7}$$

Dependența coeficientului de reflexie de frecvența luminii folosite, $R(\nu)$, de lungimea de undă $R(\lambda)$ sau de energia fascicului incident $R(h\nu)$ se numește *spectru de reflexie*. În mod analogic, dependența $\alpha(\nu)$, $\alpha(\lambda)$ sau $\alpha(h\nu)$ reprezintă *spectrul de absorbție*, iar $T(\omega)$, $T(\lambda)$ sau $T(h\nu)$ – *spectrul de transmisie* a luminii în stratul subțire.

Metodica experimentală

Pentru prepararea straturilor subțiri de ZnSe pe suporturi de sticlă s-a folosit metoda evaporării termice în vid în volum limitat [3].

Structura eșantioanelor a fost studiată prin difracție de radiații X, microscopie electronică de baleaj (Scanning Electron Microscopy – SEM) și microscopie de forță atomică (Atomic Force Microscopy – AFM). Cercetările au arătat că straturile sînt policristaline și se cristalizează în formă de blendă de zinc [4].

Grosimea d a straturilor subțiri a avut valori cuprinse între 0.10 μm și 1.30 μm și a fost măsurată cu microscopul interferențial MII-4 (tip Linnik) [5].

Prin rată de depunere r_d se înțelege raportul dintre grosimea totală a stratului depus și timpul necesar acestei depuneri. Pentru straturile subțiri, preparate de noi, rata de depunere a variat între 1.20 – 1.95 nm/s.

Pentru obținerea spectrelor de transmisie ale straturilor subțiri de ZnSe în domeniul spectral 330 – 1400nm, a fost utilizat spectrofotometrul UV-VIS tip Q-II (Carl Zeiss).

Spectrometru Q-II conține o sursă de lumină, care poate fi o lampă specială pentru măsurători în ultraviolet sau o lampă de incandescență pentru măsurători în domeniul vizibil și infraroșu apropiat. Radiația electromagnetică este descompusă de un monocromator care folosește ca element dispersiv o prismă. Ca detector de radiație se folosește un fotomultiplicator pentru domeniul ultraviolet al spectrului sau o celulă fotoelectrică pentru domeniul vizibil. Între fanta de ieșire a monocromatorului și detector este fixat un dispozitiv în care se introduc probele ce trebuie studiate.

Un eșantion este format din două componente principale: suportul transparent din sticlă și stratul subțire de ZnSe (fig.2). În acest caz, coeficientul de transmisie al eșantionului va fi:

$$T_{es} = \frac{J_{T_2}}{J_0} = \frac{J_{T_2}}{J_{T_1}} \cdot \frac{J_{T_1}}{J_0} = T_{sup} \cdot T_{str} \quad (8)$$

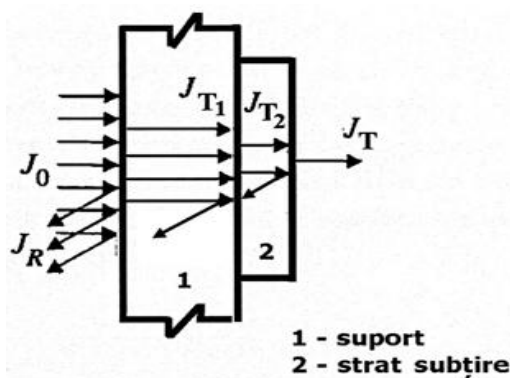


Fig. 2. Transmisia optică într-un eșantion ($T_{es} = T_{sup} \cdot T_{str}$).

De aceea, pentru determinarea experimentală a coeficientului de transmisie s-au parcurs următoarele etape:

- masurarea coeficientului de transmisie a eșantionului (suport + strat) (T_{es}),
- masurarea coeficientului de transmisie a suportului (T_{sup}),
- calcularea coeficientului de transmisie a stratului subțire conform relației

$$T = T_{str} = \frac{T_{es}}{T_{sup}} \cdot 100\% \quad (9)$$

Rezultate experimentale. Analiza

Spectrele de transmisie obținute pentru eșantioanele de ZnSe au fost analizate în funcție de grosimea straturilor.

Grosimea straturilor subțiri reprezintă un parametru important în studiul proprietăților optice și fotoelectrice. Se pot obține straturi cu grosimi prestabilite, fapt care permite prepararea unor eșantioane speciale pentru studiul acestor proprietăți.

În fig. 3 – 9 sînt prezentate spectrele de transmisie pentru straturile subțiri de ZnSe de grosimi diferite.

Transmisia probei A.015 (fig. 3) crește brusc pînă la o valoare maximă și apoi scade lent în domeniul 600 – 900nm, depinzînd de lungimea de undă. În proba A.025 (fig. 4) apar două maxime ale transmisiei, în proba A.045 (fig. 5) – trei, în proba A.060 (fig. 6) – patru, iar în proba A.077 (fig. 7) – cinci. Spectrele de transmisie pentru probe cu grosimi mai mari de 0.80μm (fig. 8 și 9) sînt formate dintr-un ansamblu de maxime și minime, iar diferența dintre transmisia maximă și cea minimă scade odată cu creșterea grosimii straturilor subțiri de ZnSe.

Primul maxim la toate spectrele de transmisie corespunde lungimii de undă de circa 460 nm. Energia acestui maxim este de circa 2.7eV și coincide cu lărgimea benzii interzise a ZnSe. Astfel, putem atribui această energie tranzițiilor bandă de valență – bandă de conducție, la centrul zonei Brillouin.

Prezența celorlalte maxime în spectrele de transmisie, probabil, este determinată de nivelele energetice adînci, localizate în interiorul benzii interzise. În cristalele de ZnSe, defectele native sînt atomii interstițiali de zinc (Zn_i) și vacanțele de seleniu (V_{Se}). Nivelele donore Zn_i sînt situate mai jos de minimul benzii de conducție ($\Delta E_d = 0.90$ eV), iar nivelele acceptoare, V_{Se} , sînt localizate mai sus de marginea superioară a benzii de valență ($\Delta E_a = 0.01$ eV) [6]. Astfel, putem considera că celelalte maxime din spectrele de transmisie pot fi asociate tranzițiilor nivel acceptor – nivel donor, nivel donor – bandă de conducție, bandă de valență – nivel acceptor.

În cazul straturilor cu grosimi mai mari de 0.80 μm, scăderea transmisiei poate fi explicată prin creșterea coeficientului de absorbție în aceste straturi [5].

Prezența în spectrele de transmisie a maximelor și minimelor datorate interferenței fasciculelor rezultate prin reflexiile multiple pe suprafețele stratului este un indiciu că probele sînt uniforme din punct de vedere al grosimii și că suprafețele straturilor sînt plane. De altfel, acest fapt a fost pus în evidență și prin studii de microscopie de forță atomică [5], din care rezultă că rugozitatea suprafeței libere a stratului este mică. O rugozitate mare sau o neuniformitate a grosimii ar fi dus la dispariția interferenței, adică la dispariția minimelor și maximelor de interferență din spectrele de transmisie [7, 8].

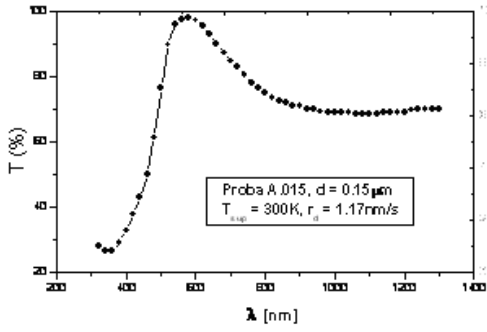


Fig. 3. Dependența $T = f(\lambda)$ pentru proba A.015.

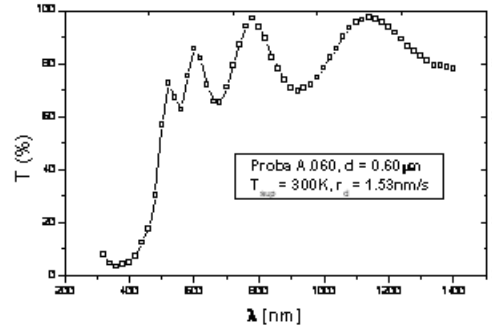


Fig. 6. Dependența $T = f(\lambda)$ pentru proba A.060.

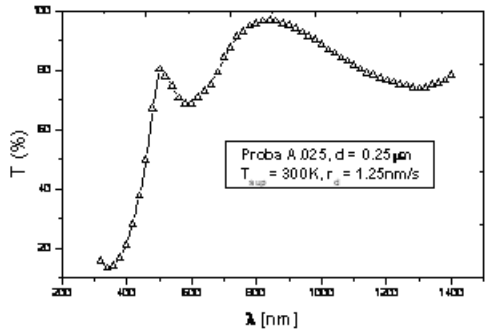


Fig. 4. Dependența $T = f(\lambda)$ pentru proba A.025.

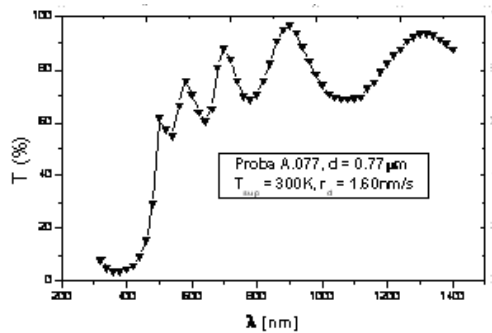


Fig. 7. Dependența $T = f(\lambda)$ pentru proba A.077.

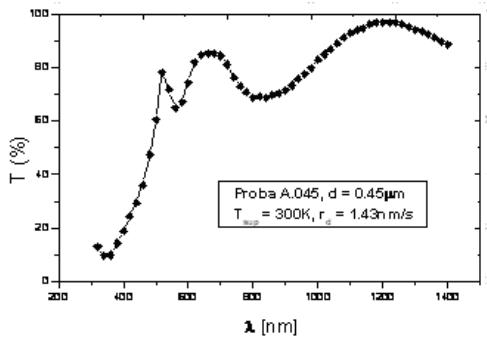


Fig. 5. Dependența $T = f(\lambda)$ pentru proba A.045.

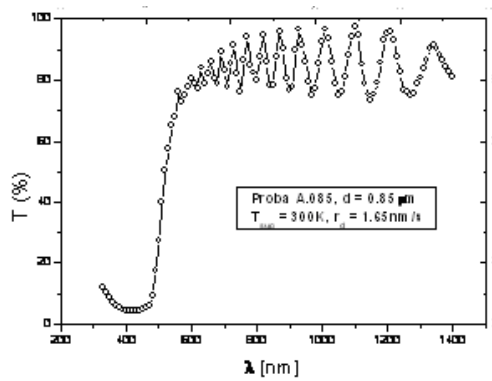


Fig. 8. Dependența $T = f(\lambda)$ pentru proba A.085.

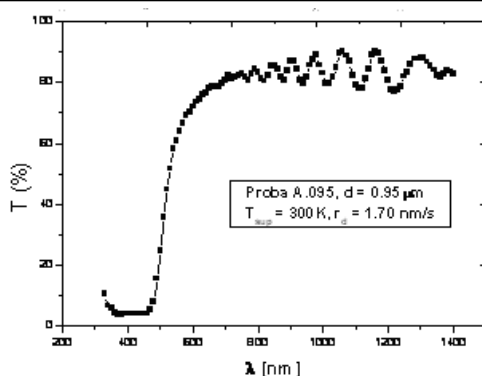


Fig. 9. Dependența $T = f(\lambda)$ pentru proba A.095.

Concluzii

Spectrele de transmisie obținute pot fi utilizate pentru determinarea coeficientului de absorbție, a indicelui de refracție și a altor mărimi caracteristice straturilor subțiri. Acestea pot oferi informații importante, pe baza cărora se pot confecționa diferite dispozitive optice și optoelectronice.

Bibliografie

1. Spînulescu I. *Fizica straturilor subțiri și aplicațiile acestora.*, București, Editura științifică, 1975, 458 p.
2. Bursuc I., Sulițanu N. *Solidul. Fenomene. Teorii. Aplicații.*, București, Editura științifică, 1991, 250p.
3. Popa M., Rusu G. I. *Obținerea straturilor subțiri de ZnSe prin metoda evaporării termice în vid // Fizică și Tehnică: procese, modele, experimente*, 2006, nr.1, p.30-37.
4. Popa M., Rusu G.I. *Influența tratamentului termic asupra morfologiei suprafeței straturilor subțiri policristaline // Fizică și Tehnică: procese, modele, experimente*, 2006, nr.1, p.26-30.
5. Popa M. E. *Contribuții la studiul proprietăților electrice și optice ale unor compuși semiconductori binari în straturi subțiri: Rezumatul tezei de doctorat*, Iași, 2003, 56p.
6. Недеогло Д.Д., Симашкевич А.В. *Электрические и люминисцентные свойства селенида цинка*, Chișinău, Știința, 1984.
7. Swanepoel R. *Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon // J. Phys. E: Sci. Instrum.*, 1983, v. 16, p. 1214-1222.
8. Swanepoel R. *Determination of the surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films // J. Phys. E: Sci. Instrum.*, 1984, v. 17, p. 896-903.

OPTICAL TRANSMISSION IN ZnSe THIN FILMS

Mihail Popa („Alec Russo” State University, Republic of Moldova)

Gheorghe Ioan Rusu („Al. I. Cuza” University, Romania)

Optical transmission spectrums for ZnSe thin films have been obtained in the spectral domain of 330 – 1400nm. The presence of interference maxima and minima in transmission spectrums is determined by the multiple reflections from the film surface and represents one index that the samples are uniform and that films surfaces are plane.

With the growth of the films thickness we observe a growth in the number of interference maxima and minima, and for the thickness of $d > 0.77\mu\text{m}$, the difference between maximal and minimal transmission decreases.

Prezentat la redacție la 11.12.06

CZU: 538.9

DETERMINAREA INDICELUI DE REFRACTIE A STRATURILOR SUBȚIRI DE ZnSe PRIN METODA SWANEPOEL

Mihail Popa (Universitatea de Stat „Alec Russo”, Republica Moldova)

Gheorghe Ioan Rusu (Universitatea „Al. I. Cuza”, România)

Spectrele de transmisie, reflexie și absorbție ale straturilor subțiri de ZnSe au fost cercetate în domeniul spectral de lungimi de undă 300 – 1400 nm. Din spectrele de transmisie, folosind metoda „anvelopei” propusă de Swanepoel, a fost determinat indicele de refracție ale straturilor subțiri policristaline de ZnSe. Acesta scade odată cu creșterea grosimii și crește în urma tratamentului termic. Pentru explicarea dispersiei normale a indicelui de refracție a fost folosit modelul unui singur oscilator.

Introducere

În ultimii ani se studiază intens proprietățile fizice ale compușilor semiconductori sub formă de straturi subțiri, datorită importanței tehnologice de aplicație ale acestora în dispozitivele semiconductoare.

Seleniura de zinc este un material din categoria compușilor $A^{\text{II}}B^{\text{VI}}$ și are structură cubică (de tip blendă de zinc) și bandă interzisă largă de circa 2.7eV la temperatura camerei. Acestea emit perspective de aplicație a ZnSe la fabricarea laserilor cu diode și a diodelor emițătoare de lumină care funcționează în domeniul culorii albastre [1].

Studiul proprietăților optice ale straturilor subțiri semiconductoare permite obținerea de informații importante privind structura de benzi energetice a semiconductoarelor și mecanismul de interacțiune a radiației electromagnetice cu stratul subțire. Scopul acestei lucrări este de a prezenta o metodă nouă de

determinare a indicelui de refracție din spectrele de transmisie ale straturilor subțiri de ZnSe.

Descrierea metodei

Indicele de refracție al straturilor subțiri a fost determinat din spectrele de transmisie optică folosindu-se metoda “anvelopei” propusă de R.Swanepoel [2, 3].

Să considerăm un strat subțire omogen de grosime uniformă d și indice de refracție complex $\tilde{n} = n - ik$, unde n este partea reală a indicelui de refracție, ik – partea imaginară a indicelui de refracție, iar k – coeficientul de extincție. Stratul este depus pe un suport transparent cu indicele de refracție n_s , suportul este considerat neted, fără asperități, avînd grosimea mult mai mare decît grosimea (d) a stratului. Un astfel de sistem este prezentat în fig. 1, plasat în aer cu indicele de refracție $n_0 = 1$.

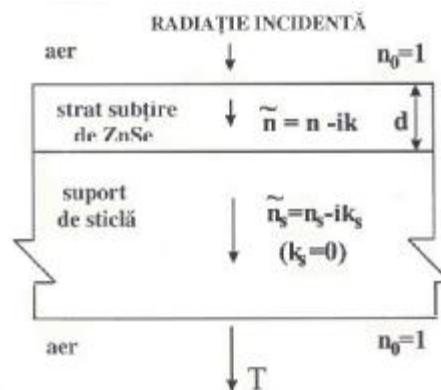


Fig. 1. Sistemul strat – suport.

Spectrele de transmisie prezintă o serie de maxime și minime (fig. 2), ceea ce înseamnă că pentru o analiză riguroasă a acestor spectre trebuie să se țină seama de interferența datorită reflexiilor multiple în interiorul stratului.

În esență metoda Swanepoel constă în determinarea înfășurătorilor minimelor și maximelor din spectrele de transmisie (fig. 2). Astfel, începînd cu $\lambda = 750\text{nm}$ se pot găsi perechi de valori T_M și T_m pentru fiecare lungime de undă.

Pentru sistemul din fig. 2, transmisia optică la incidență normală se poate exprima prin relația [2-4]:

$$T = \frac{Ax}{B - Cx \cos \psi + Dx^2}, \quad (1)$$

unde

$$\begin{aligned} A &= 16n^2 \cdot n_s, B = (n+1)^2(n+n_s^2), C = 2(n^2-1)(n^2-n_s^2), \\ D &= (n-1)^2(n-n_s^2), \psi = 4\pi nd/\lambda d, x = \exp(-ad). \end{aligned} \quad (2)$$

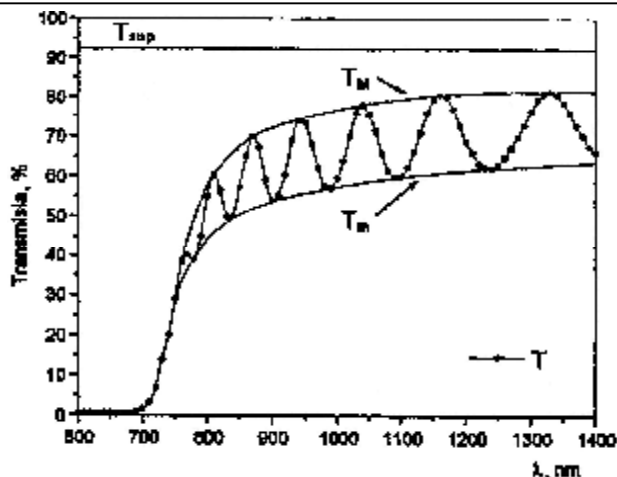


Fig.2. Maxime și minime de interferență în spectrul de transmisie.

Valorile transmisiei la extremele franjelor de interferență (T_M și T_m) se obțin din condiția de interferență $\cos y = +1$ pentru maxim și $\cos y = -1$ pentru minim sau din condiția [1, 2, 3]:

$$2nd = m\lambda, \quad (3)$$

m fiind un număr întreg pentru maxime și semiîntreg pentru minimele de interferență. În aceste condiții maximele și minimele de interferență se găsesc pe două curbe (numite înfășurători) și T_M și T_m (fig. 2) se calculează după relațiile [2, 3]

$$T_M = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (4)$$

și

$$T_m = \frac{Ax}{B + Cx + Dx^2}. \quad (5)$$

Trebuie remarcat faptul că aceste relații sînt valabile numai în domeniul în care absorbția este mică sau medie și coeficientul de extincție k poate fi neglijat. În aceste condiții, transformînd relațiile (4) și (5), obținem

$$\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T_M} = \frac{2A}{C}, \quad (6)$$

iar dacă înlocuim expresiile lui A și C din relația (2), atunci:

$$n = [N + (N^2 - n_s^2)^{1/2}]^{1/2}, \quad (7)$$

în care

$$N = 2n_s \cdot \frac{T_M - T_m}{T_M \cdot T_m} + \frac{n_s^2 + 1}{2}. \quad (8)$$

Indicele de refracție calculat din relația (7) poate fi considerat ca o primă aproximație. Dacă se cunoaște grosimea stratului, folosind relația (3), se poate determina ordinul de interferență m . Valorile stabilite vor fi approximate ca valori întregi sau semiîntregi, după cum spectrul de transmisie prezintă la lungimea de undă respectivă un maxim sau minim. Utilizînd aceste valori ale ordinului de

interferenți, cu ajutorul relației (7), se pot calcula noile valori ale indicelui de refracție.

În domeniul absorbției medii și slabe coeficientul de absorbție se determinată prin relația [2, 3, 4]:

$$\alpha = -\frac{I}{d} \ln x, \quad (9)$$

în care x este absorbanța și poate fi calculată prin formula [10, 13, 14]:

$$x = \frac{E_M - [E_M^2 - (n^2 - 1)^3 (n^2 - n_s^2)]^{1/2}}{(n - 1)^3 (n - n_s^2)}, \quad (10)$$

unde

$$E_M = \frac{8n^2 n_s^2}{T_M} + (n^2 - 1)(n^2 - n_s^2). \quad (11)$$

Dacă n_1 și n_2 sînt indicii de refracție pentru două maxime (sau minime) adiacente, iar λ_1 și λ_2 – respectivele lungimi de undă, atunci grosimea stratului este determinată de relația [2, 3]:

$$d = \frac{\lambda_1 \lambda_2}{2(\lambda_1 n_2 - \lambda_2 n_1)}. \quad (12)$$

Rezultate experimentale. Analiză

Etaple de calcul al indicelui de refracție pentru straturile subțiri de ZnSe au fost următoarele:

a) calcularea indicelui de refracție a suportului n_s din spectrul de transmisie a acestuia, $T_{sup} = f(I)$ cu ajutorul relației [2, 3]

$$n_s = \frac{I}{T_{sup}} + \left(\frac{I}{T_{sup}^2} - I \right)^{1/2}; \quad (13)$$

b) trasarea înfășurătorilor minimelor și maximelor de interferență în spectrul de transmisie al unui strat subțire $T = f(\lambda)$ și determinarea pentru fiecare lungime de undă a unor perechi de valori T_M și T_m ;

c) calcularea coeficientului N folosind relația (8);

d) calcularea valorilor lui n cu ajutorul formulei (7).

În fig. 3 sînt reprezentate dependențele de lungimea de undă a indicelui de refracție n al straturilor subțiri de ZnSe. Investigațiile au fost efectuate în intervalul lungimilor de undă 620-1000nm. Creșterea grosimii conduce la micșorarea indicelui de refracție, acesta din urmă variind de la 2.93 (pentru proba A.045) pînă la 2.77 (pentru proba A.085).

Valorile indicelui de refracție n pentru straturile subțiri de ZnSe sînt în bună concordanță cu cele obținute pentru cristalele de ZnSe [9].

În fig. 4 este reprezentată dispersia indicelui de refracție pentru proba A.066 înainte și după tratamentul termic al acesteia. Tratamentul termic modifică nesemnificativ dispersia indicelui de refracție, fapt confirmat și pentru spectrele de transmisie ale probelor cu grosimi $d > 0.6 \mu\text{m}$ [7, 8].

Dispersia indicelui de refracție în domeniul de transparență (pentru energii ale fotonilor mai mici decât lărgimea benzii interzise), conform modelului unui singur oscilator [5, 6] poate fi descrisă prin relația:

$$n^2 - 1 = \frac{E_0 E_d}{E_0^2 - (h\nu)^2}, \quad (14)$$

în care E_0 este un parametru a cărui valoare este egală aproximativ cu dublul lărgimii benzii interzise ($E_0 \cong 2E_g$), iar E_d este un parametru de dispersie.

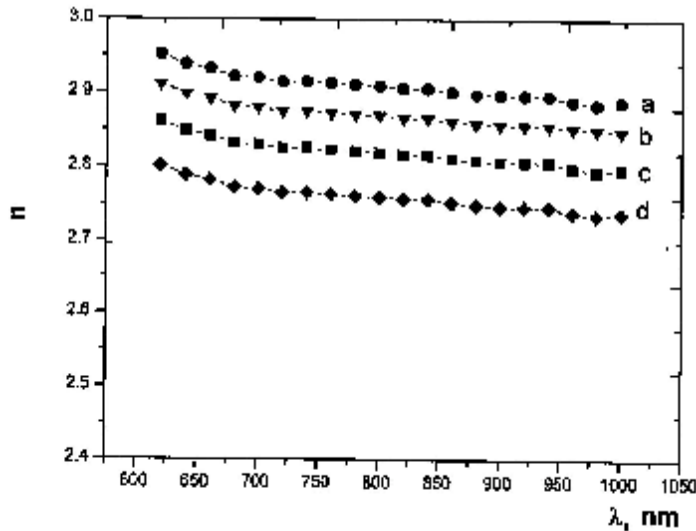


Fig. 3. Indicele de refracție al unor straturi subțiri de ZnSe cu grosimi diferite: a. Proba A.045, $d = 0.45\mu\text{m}$, $T_{\text{sup}} = 300\text{K}$; b. Proba A.060, $d = 0.60\mu\text{m}$, $T_{\text{sup}} = 300\text{K}$; c. Proba A.077, $d = 0.77\mu\text{m}$, $T_{\text{sup}} = 300\text{K}$; d. Proba A.085, $d = 0.85\mu\text{m}$, $T_{\text{sup}} = 300\text{K}$.

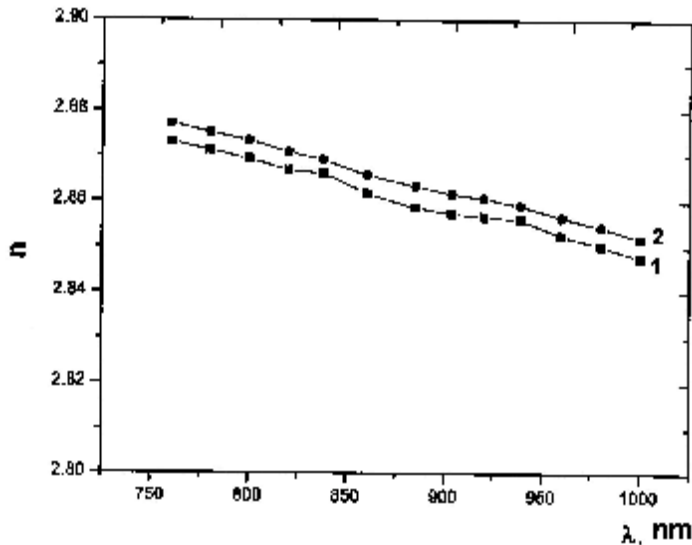


Fig. 4. Influența tratamentului termic asupra indicelui de refracție: Proba A.045 ($d = 0.45\mu\text{m}$, $T_{\text{sup}} = 300\text{K}$): 1 – proba netratată termic, 2 – proba tratată termic (300 – 500K).

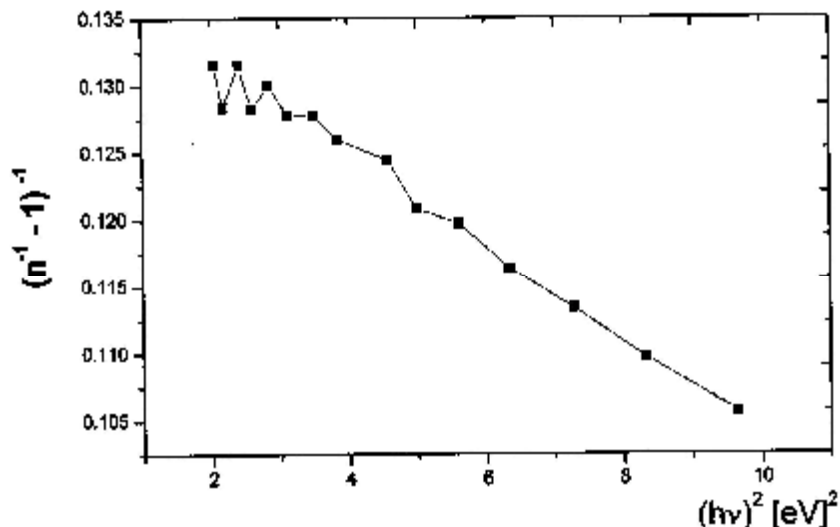


Fig. 5. Dependența $1/(n^2 - 1) = f(hv)^2$ pentru proba A.060.

În fig. 5 este reprezentată dependența $1/(n^2 - 1) = f(hv)^2$ pentru un strat subțire de ZnSe depus pe sticlă. Din panta dependenței liniare se obțin valorile respective ale lui E_d și E_0 . În tabel sînt ilustrate aceste valori și pentru alte straturi subțiri de ZnSe. Valorile lărgimii benzii interzise $E_g = 2.85 - 2.96$ eV obținute prin această metodă sînt în bună concordanță cu cele obținute din spectrele de absorbție $\alpha^2(hv)^2 = f(hv)$ [7, 8].

Parametrii modelului unui singur oscilator

Proba	d, μm	T_{sup} , K	r_d , nm/s	E_d , eV	E_0 , eV
A.045	0.45	300	1.43	43.47	5.92
A.060	0.60	300	1.50	42.45	5.80
A.077	0.77	300	1.60	41.86	5.71

Concluzii

Metoda „anvelopei” propusă de R.Swanepoel, folosită pentru determinarea indicelui de refracție ale straturilor subțiri, reprezintă o metodă modernă folosită în fizica straturilor subțiri. Rezultatele obținute conform acestei metode sînt în concordanță cu rezultatele obținute pentru probele masive.

Bibliografie

1. Kazmerski L. L. *Polycrystalline and Amorphous Thin Films and Devices*, New York, Academic Press, 1980.
2. Swanepoel R. *Determination of the thickness and optical constants of amorphous silicon* // J. Phys. E: Sci. Instrum., 1983, v. 16, p. 1214-1222.

3. Swanepoel R. *Determination of the surface roughness and optical constants of inhomogeneous amorphous silicon films* // J. Phys. E: Sci. Instrum., 1984, v. 17, p. 896-903.
4. Margues E., Ramires-Malo J., Villares P., Jimenes-Garay R., Ewen P. J., Owen A. E. *Calculation of the thickness and optical constants of amorphous arsenic sulphide films from their transmission spectra* // J. Phys. D: Appl. Phys., 1992, v. 25, p. 535-541.
5. Wemple S. H., DiDomenico M. *Behavior of the Electronic Dielectric Constant in Covalent and Ionic Materials* // Phys. Rev. B, 1971, v. 3, nr. 4, p. 1338-1346.
6. Wemple S. H. *Refractive – Index Behaviour of Amorphous Semiconductors and Glasses* // Phys. Rev. B, 1973, v. 7, nr. 8, p. 3767-3770.
7. Rusu G. I., Popa M. E., Rusu G. G., Salaoru Iulia N. *On the electronic transport properties of polycrystalline ZnSe films* // Applied Surface Science, 2003, v. 218, nr. 1-4, p. 213-231.
8. Popa M. E., Rusu G. I. *On the optical properties of polycrystalline ZnSe thin films* // Physics of Low – Dimensional Structures, 2003, v. 7/8, p. 43-53.
9. Недеогло Д.Д., Симашкевич А.В. *Электрические и люминисцентные свойства селенида цинка*, Chișinău, Știința, 1984.

THE DETERMINATION OF THE INDEX OF REFRACTION OF THIN FILMS BY SWANEPOEL METHOD

Mihail Popa („Alec Russo” State University, Republic of Moldova)

Gheorghe Ioan Rusu („Al. I. Cuza” University, Romania)

The spectral dependences of transmission, reflection and absorption for ZnSe thin films have been studied in spectral domain of 300 – 1400 nm. Using „tyre’s” method proposed by Swanepoel, from the spectral dependences of transmission, the index of refraction of the thin polycrystalline films of ZnSe was determined. This lowers while thickness grows and rises after thermal treatment. To explain the normal dispersion of the index of refraction the model of a single oscillator was used.

Prezentat la redacție la 11.12.06

CZU 621.373.8

DEPENDENȚA PARAMETRILOR ENERGETICI AI LASERULUI COMPACT CU EXCIMER XeCl DE COMPONENȚA MEDIULUI ACTIV

Ion Olaru, Valeriu Guțan

(Universitatea de Stat "Alec Russo", Republica Moldova)

În lucrare sînt prezentate principiile de elaborare a unui laser compact cu excimer și rezultatele cercetărilor experimentale ale influenței furnizorilor de halogen și ale raportului componentilor mediului activ asupra parametrilor energetici ai laserului cu XeCl. În calitate de furnizori de halogen au fost utilizați următorii compuși: HCl; CHCl₃; CCl₄. Experimental, a fost stabilit raportul optimal al componentilor mixturii și energia maximală în impuls pentru fiecare furnizor de halogen: HCl:Xe:He – 5:10:400 - 22mJ; CHCl₃:Xe:He -1:10:1000 - 10 mJ; CCl₄:Xe:He - 1:10:1000 - 5 mJ.

Pentru cercetările științifice în domeniul tehnologiilor de prelucrare a suprafeței structurilor semiconductoare sînt necesare surse de radiație laser ultravioletă cu parametri energetici avansați și particularități de construcție adaptate condițiilor de laborator.

Un model de laser compact cu excimer XeCl ($\lambda = 308$ nm) destinat cercetărilor științifice a fost elaborat în laboratorul "Electronică cuantică și tehnologii laser" al Universității de Stat "Alec Russo" din Bălți [1, 2].

Particularitățile de construcție ale laserului cu excimer elaborat și, corespunzător, performanțele lui energetice au fost determinate, în mare măsură, de schema de pompaj aplicată, sistemul de preionizare și componența mediului activ.

Dintre metodele de pompaj cunoscute (excitarea cu fascicol de electroni, prin radiație Roentgen și prin descărcări electrice transversale cu ionizare prealabilă) a fost selectată ultima datorită simplității și eficienței în obținerea unei puteri medii relativ înalte.

Metoda de pompaj prin descărcare electrică cu preionizare poate fi realizată prin diferite scheme: schema Blumlein, schema Blumlein cu linii de transmisie și elemente distribuite, schema cu descărcare directă prin trigatron sau eclator de tensiune înaltă.

Pentru excitarea laserului elaborat a fost utilizată schema Blumlein cu inversare de tensiune, astfel fiind exclus elementul de conectare din circuitul de pompaj (fig.1).

După elaborarea schemei de pompaj, următorii factori (importanți, atît din punct de vedere constructiv, cît și din punct de vedere al parametrilor energetici) sînt modul de introducere a energiei de pompaj în interstițiul de descărcare și metoda de preionizare.

În modelul elaborat a fost utilizat modul de pompaj prin descărcare electrică transversală și metoda de preionizare ultravioletă prin descărcare electrică pe suprafața unui dielectric. În calitate de dielectric au fost folosite tuburi de cuarț.

În fig.1 este prezentată schema-bloc a sistemului de pompaj, care include camera laser cu liniile de preionizare (L_1, L_2), acumulatorul de energie format din două baterii de condensatoare (C_1, C_2) conectate consecutiv la electrozii de pompaj, eclatoarele de tensiune înaltă (E_1, E_2), destinate preionizării și introducerii energiei în mediul activ și blocul de alimentare în impuls (T_1 - elementul de acordare a blocului cu acumuloarele de energie).

Laserul cu excimer elaborat după principiile expuse mai sus este înzestrat cu camera cu volumul redus al mediului activ ($V= 270 \text{ cm}^3$). În acest caz, performanțele energetice ale laserului sînt determinate cu preponderență de proprietățile mediului activ, în particular, de presiunea mediului gazos și concentrația componentilor amestecului.

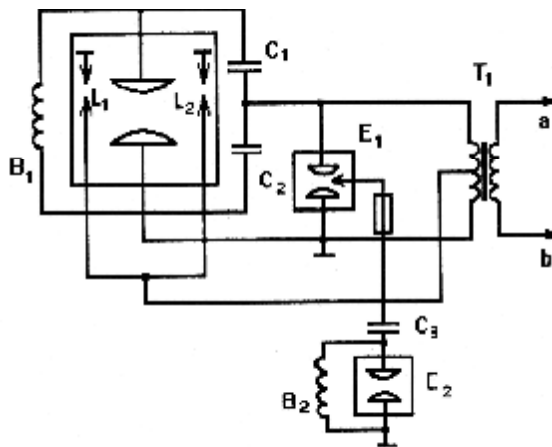


Fig.1. Sistemul de pompaj al laserului cu excimer. T_1 -transformator de alimentare în impuls; E_1, E_2 – eclatoare de tensiune înaltă; L_1, L_2 – linii de preionizare; C_1, C_2 –acumulator de energie.

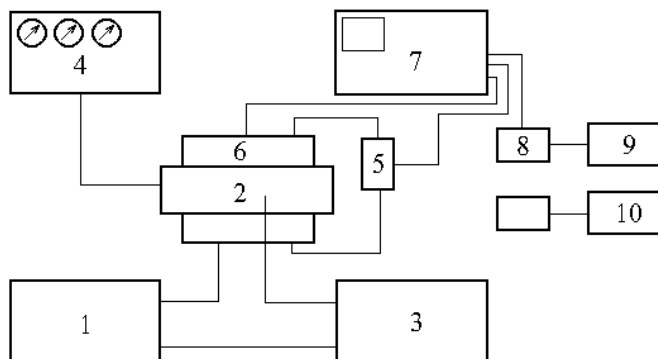


Fig.2. Schema-bloc a instalației experimentale: 1-bloc de alimentare; 2 - camera laser; 3 -sistemul de preionizare; 4 - sistemul de vacuare și formare a amestecurilor gazoase; 5 - divizor de tensiune înaltă; 6 - sînt pentru măsurarea curentului; 7- osciloscop de tipul C9-4A; 8 - fotocatod FĂC-19; 9 - bloc de alimentare a fotocatodului; 10 - aparat de măsurare a energiei IMO-2M.

Luând în considerare particularitățile de construcție ale laserului cu excimer XeCl elaborat, în prima fază a lucrărilor experimentale a fost determinată tensiunea optimă de încărcare a acumulatorului de energie și parametrii sistemului de preionizare.

Ulterior, a fost determinată dependența energiei de radiație a laserului de componența amestecului gazos, raportul componentelor și presiunea totală în cameră în cazul diferiților furnizori de halogen.

Instalația experimentală include (fig.2): laserul propriu-zis, sistemul de preionizare, sistemul de vacuumare și formare a amestecurilor gazoase și aparatul de măsură. Aparatul de măsurare permite studierea și înregistrarea impulsurilor tensiunii de pompaj ale laserului ($4 \times 10^4 \text{V}$), a curentului de descărcare (10^4A), a formei și duratei impulsului laser (10^{-8} - 10^{-9} s), a energiei medii a radiației obținute.

Inițial, în experimentele realizate cu camera cu volum redus a fost utilizat amestecul gazos HCl:Xe:He. Necesitatea de înnoire periodică a mediului activ a determinat utilizarea, de rînd cu furnizorul tradițional de halogen (HCl), și a altor furnizori mai puțin agresivi și mai accesibili, cum ar fi CHCl_3 și CCl_4 . Acest lucru a determinat necesitatea studierii posibilităților de optimizare a parametrilor energetici ai laserului în cazul utilizării furnizorilor de halogen în stare lichidă.

În fig.3 este prezentat sistemul de vacuumare și formare a amestecurilor gazoase care permite vacuumarea camerei laser, formarea amestecurilor gazoase cu diferiți furnizori de halogen, dozarea componentelor amestecului în camera laser, măsurarea presiunii și a gradului de vacuumare în cameră, vacuumarea și introducerea gazului în eclatoare.

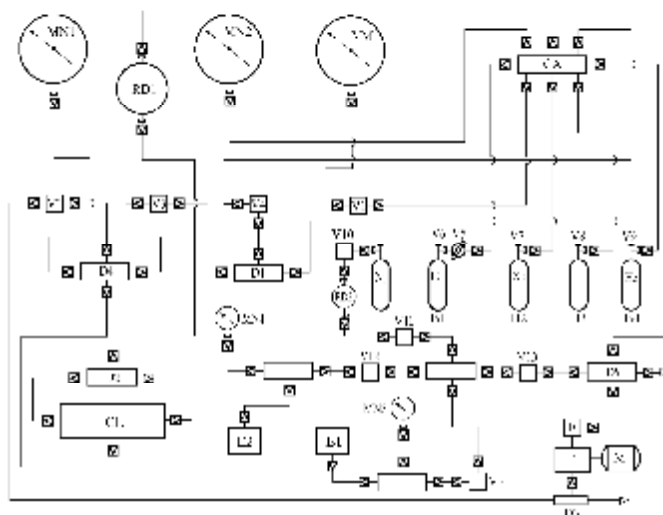


Fig.3. Sistemul de vacuumare și formare a amestecurilor gazoase.

Sistemul de vacuumare și formare a amestecurilor gazoase conține următoarele componente:

1. Sistemul de vacuumare, format din pompa de vacuum de tipul RVN-20 (P), filtrul de protecție a sistemului de vacuumare contra poluării cu vapori de ulei (F), conductele de gaz, ventilele de cuplare și elementele de ramificare.
2. Sistemul de formare a mixturilor gazoase, care include camera de mixare a gazelor (CA), rezervoarele (B_1, B_2, B_3, B_4), dispozitivele de măsurare a vacuumului și a presiunilor în camera de mixare și în camera laser (VM, MN1, MN2), reductorul RD1, ventile și elemente de ramificare.
3. Sistemul de introducere a mediului gazos în eclatoare, care include rezervorul cu azot gazos (B_5), reductorul (RD2), manometrele (MN3, MN4), ventile, elemente de ramificare, eclatoarele (E1, E2).

Volatilitatea sporită a agenților furnizori lichizi de halogen ($CCl_4, CHCl_3$) a permis obținerea diferitelor presiuni a vaporilor saturați prin variația temperaturii.

Pentru determinarea presiunii și a raportului optimal al componentelor amestecului gazos în cazul fiecărui furnizor de halogen în parte, a fost studiată dependența energiei medii în impuls a radiației laser de presiunea absolută pentru mixturi cu diferită concentrație a componentelor (fig.4, fig.5, fig.6).

În fig.4 este reprezentată dependența energiei medii în impuls a laserului XeCl de presiunea absolută a amestecului gazos.

În calitate de furnizor de halogen a fost folosit HCl. Datele experimentale demonstrează că energia impulsului crește odată cu mărirea concentrației halogenului și atinge valoarea maximală pentru proporția 5:10:400 (HCl:Xe:He) la presiunea absolută a mediului egală cu 4,8 at. Pentru această concentrație, creșterea în continuare a presiunii absolute nu este posibilă din cauza apariției descărcărilor în formă de stream-eri (linia întreruptă). Totodată, se observă o deplasare a maximumului energiei în impuls spre regiunea presiunilor absolute mai mici odată cu creșterea concentrației halogenului.

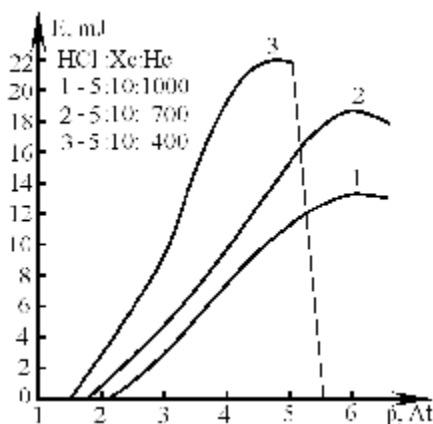


Fig.4. Dependența energiei medii în impuls a laserului XeCl de presiunea absolută a amestecului gazos HCl:Xe:He pentru diferite proporții ale componentelor.

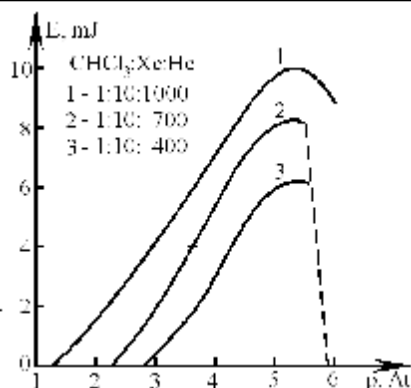


Fig.5. Dependența energiei medii în impuls a laserului XeCl de presiunea absolută a amestecului gazos CHCl_3 :Xe:He pentru diferite proporții ale componentilor.

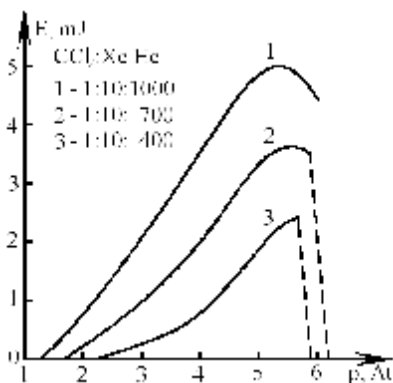


Fig.6. Dependența energiei medii în impuls a laserului XeCl de presiunea absolută a amestecului gazos CCl_4 :Xe:He pentru diferite proporții ale componentilor.

În fig.5 și fig.6 este reprezentată aceeași dependență ca în fig.4, doar pentru cazurile când în calitate de furnizori de halogen sînt utilizați CHCl_3 și CCl_4 în stare lichidă. Energia maximală în impuls, în acest caz, poate fi obținută cu CHCl_3 în calitate de furnizor de halogen la proporția componentilor 1:10:1000 și este egală cu 10 mJ la presiunea absolută de 5,5 At. Odată cu mărirea concentrației halogenului, energia medie în impuls scade.

Rezultatele experimentale prezentate permit de a constata că:

- în cazul când furnizorul de halogen este gazos (HCl), energia crește de la 12 mJ pînă la 22 mJ, odată cu creșterea concentrației clorului.
- în cazul când furnizorii de halogen sînt în formă lichidă (CCl_4 , CHCl_3), dependența este inversă, ceea ce nu permite obținerea energiilor mai mari de 10 mJ.

Totodată, pentru toate tipurile de mixturi au fost determinate valorile absolute, depășirea cărora duce la trecerea descărcării difuze în descărcări cu strimeri, care provoacă dispariția generației.

Concluzii

1. A fost obținută radiația laser în mediu activ format cu diferiți furnizori de halogen:
 - furnizor de halogen în stare gazoasă - HCl;
 - furnizor de halogen în stare lichidă - CCl₄, CHCl₃.
2. A fost determinată experimental dependența energiei medii a radiației laser de raportul componentelor amestecului gazos (obținut cu diferiți furnizori de halogen) și de presiunea absolută în camera laser.
3. Au fost determinate valorile optime ale presiunii absolute și parțiale în mediul activ gazos.

Bibliografie

1. Țițanu V., Olaru I., Sava P. *Laser compact cu excimer XeCl*// Catalogul oficial al Salonului al II-lea Internațional al Invențiilor, Cercetării și Transferului Tehnologic, Iași, 1994, p.70.
2. Jeleascov M., Țițanu V., Nilva Z., Olaru I., Sava P. *Laser compact cu excimer XeCl* // Buletinul Academiei de științe din Republica Moldova, seria Tehnică și fizică, Chișinău, 1995, nr.2.
3. Месяц Г.А., Осипов В.В., Тарасенко В.Ф. *Импульсные газовые лазер*, Москва, Наука, 1991, 271 с.
4. Баранов В.Ю., Борисов В.М., Степанов Ю.Ю. *Электроразрядные эксимерные лазеры на галогенидах инертных газов*, Москва, Энергоиздат, 1988, 216 с.
5. Малинин А.М., Л.Л. Шимон, И.И. Опачко и др. *Повышение энергии излучения и ресурса работы малогабаритного газоразрядного импульсно-периодического эксимерного XeCl лазера* // Квантовая электроника, Москва, т. 21, №12, 1994. с. 1174-1176.

THE DEPENDENCE OF THE ENERGETIC PARAMETERS OF THE COMPACT LASER WITH EXCIMER XeCl ON THE COMPOSITION OF THE ACTIVE MEDIUM

Ion Olaru, Valeriu Guțan

(„Alec Russo” State University, Republic of Moldova)

In this work are represented some principles of elaboration of a compact excimer XeCl laser and the results of the experimental research of dependence of energetic parameters of the laser on the correlation of the components of active area for the different donators. In quality of donator, the halogen was used in the following materials: HCl; CHCl₃; CCl₄. Experimentally were determined some optimum correlations of the components of the active area and the maximum energy in pulse for every donator of halogen: HCl:Xe:He - 5:10:400 – 22 mJ; CHCl₃: Xe:He - 1:10:1000 – 10 mJ; CCl₄:Xe:He - 1:10:1000 – 5 mJ.

Prezentat la redacție la 14.12.06

C.Z.U.621.9.048.4.

TENSIUNI REMANENTE ÎN STRUCTURILE SUPERFICIALE FORMATE LA ALIERE PRIN METODA ELECTROEROZIUNII ÎN CÎMP MAGNETIC

Pavel Pereteatcu, Boris Ursan

(Universitatea de Stat „Alec Russo”, Republica Moldova)

În lucrare sînt prezentate rezultatele cercetărilor experimentale privind aprecierea tensiunilor remanente în straturile superficiale obținute la alierea prin scînteii electrice în cîmp magnetic. Rezultatele cercetărilor experimentale au demonstrat că pentru anumite valori ale vectorului inducției cîmpului magnetic, mărimea tensiunilor remanente este cu mult mai mică decît în cazul alierii cu scînteie electrică în lipsa cîmpului.

Este cunoscut faptul că în straturile superficiale, în procesul alierii cu scînteii electrice (ASE), apar tensiuni remanente de întindere [1, 2, 3, 4], a căror valoare este cu atît mai mare, cu cît este mai mare energia descărcărilor electrice în impuls prin intermediul cărora se efectuează prelucrarea. Pînă la o anumită limită tensiunile remanente din straturile de depunere sînt benefice, provocînd sporirea durității acestuia, însă dacã se depășește o anumită mărime numită critică, care este funcție de proprietățile materialului de depunere, pot fi observate și fenomene de distrugere a stratului format. Din aceste motive, este necesară studierea comportării diferite materiale la formarea straturilor de depunere prin metoda sus-numită în cazul cînd asupra interstițiului se va aplica un cîmp magnetic.

Pentru măsurarea tensiunilor remanente în straturile superficiale de depunere prin metoda ASE cu suprapunerea pe interstițiu a cîmpului magnetic au fost preparate epruvete speciale confecționate din oțeluri „Ст 3” și „Ст 45” în formă de plăcuțe cu dimensiunile 10x2x100 mm. După rectificare, acestea au fost supuse recoacerii în vid pentru a înlătura tensiunile remanente, provocate de prelucrarea mecanică (deformații elastice și plastice, ecruisarea etc.). Acestea din urmă pot influența rezultatele măsurărilor. Epruvetele erau supuse prelucrării prin aliere pe o parte a plăcuței, cu ajutorul instaslației EFI-10M la regimul cu energia descărcării egală cu 3,0 J.

Formarea straturilor de depunere (din Ni, Cr și aliajul „BK 20”) pe suprafețele prelucrate a epruvetelor se execută cu timpul specific de aliere de 1 min/cm². Asupra interstițiului s-au aplicat cîmpuri magnetice, vectorul inducției cărora varia în limitele 0...0,1 T.

După cum s-a menționat, apariția tensiunilor remanente, în general, și la prelucrarea cu ASE, în particular, este condiționată de modul decurgerii procesului de deformare elasto-plastică și de transformările de fază în volume mici și strict localizate a catodului-piesă. Acesta se formează prin acțiunea fasciculelor de ioni în procesul descărcărilor electrice în impuls pe suprafață și a șocului materialului prelevat de pe suprafața anodului pe cea a piesei și, desigur, de acțiunea de scurtă durată a surselor punctiforme de căldură [4].

Descărcările electrice în impuls, cu o durată de zeci și sute de microsecunde, cu o densitate a puterii de 10^5-10^{12} W/cm², provoacă o încălzire superficială rapidă (cu gradient de temperatură în spațiu de $\sim 10^6$ K/cm și cu viteze de cca $\sim 10^7-10^{11}$ K/sec). Răcirea volumelor mici de material topit decurge cu viteze apropiate de cele critice. La ASE în straturile superficiale au loc procese micrometalurgice însoțite de transformări de fază și structură (în particular are loc călirea, practic, din faza lichidă cu formarea unei structuri fine a stratului de depunere). În acest caz, asupra mărimii tensiunilor remanente vor influența și aceste fenomene. În același timp, dacă alierea cu scînteii electrice se efectuează cu aplicarea suplimentară a cîmpului magnetic asupra interstițiului, atunci ne putem aștepta la transformări martensitice similare cazului călirii și revenirii executate în mod clasic [5]. Intensificarea fenomenelor de descompunere a martensitei conduce la micșorarea tensiunilor remanente și viceversa: procesele de formare a martensitei provoacă sporirea valorilor acestora. Intensificarea proceselor de relaxare sub acțiunea cîmpului magnetic, în majoritatea cazurilor, constituie factorul principal de schimbare a epurii tensiunilor remanente. În același timp, micșorarea valorilor tensiunilor remanente în procesele de tratare termică în cîmpuri magnetice micșorează probabilitatea distrugerii fragile din cauza formării fisurilor și conduce la diminuarea deformațiilor oțelurilor călite, creează condiții favorabile de exploatare a pieselor în cîmpuri de forțe variabile și a frecării abrazive.

Din analiza datelor experimentale obținute rezultă că, atît în cazul lipsei, cît și în cel al aplicării cîmpului magnetic asupra interstițiului, la ASE în straturile superficiale ale epruvetelor iau naștere tensiuni remanente axiale de întindere.

Influența valorii inducției cîmpului magnetic se reduce la următoarele: în cazul alierii suprafeței cu electrozi din nichel mărirea valorii inducției pînă la 0,08 T duce la micșorarea tensiunilor reziduale axiale de întindere, iar pentru valori mai mari ale inducției magnetice are loc o creștere a tensiunilor reziduale (vezi tabelul).

Schimbarea rezistenței mecanice S ale oțelurilor „Cr 3” și „Cr 45” supuse ASE în dependență de valoarea inducției cîmpului magnetic, B

S , Mpa \ B, T	0,0	0,02	0,04	0,06	0,08	0,1
Ni/Oțel 3	1	0,77	0,96	0,89	0,79	1,16
Ni/Oțel 45	1	1,4	0,89	0,74	0,36	1,31
Cr/Oțel 3	1	1,04	0,94	0,30	0,78	0,72
Cr/Oțel 45	1	0,68	0,58	0,04	1,15	0,60
BK 20/Oțel 3	1	1,29	1,35	1,24	1,16	1,21
BK 20/Oțel 45	1	1,52	1,56	1,53	1,18	1,61

Pentru o valoare a inducției cîmpului magnetic de 0,08 T nivelul tensiunilor reziduale axiale sînt cu 21% mai mici, decît în lipsa cîmpului magnetic, iar pentru B=0,1T se observă o creștere a tensiunilor reziduale axiale. În cazul alierii oțelului cu anozii din crom în cîmp magnetic se observă o micșorare a tensiunilor reziduale axiale odată cu creșterea mărimii inducției magnetice. La aplicarea unui cîmp magnetic de mărirea B=0,06 T, tensiunile axiale de întindere constituie cca 70%,

față de cazul alierii cu electrozi din Ni. O creștere în continuare a valorilor inducției magnetice duce la creșterea nivelului tensiunilor reziduale axiale, care însă nu întrece acel nivel inițial ce se realizează la alierea cu crom în lipsa câmpului magnetic. Se poate constata faptul că, în cazul alierii oțelului cu electrozi din nichel și crom, există valori ale inducției magnetice pentru care se observă o scădere bruscă a nivelului tensiunilor reziduale axiale de întindere.

La alierea cu electrozi de „BK 20”, se observă o altă legitate: odată cu creșterea inducției magnetice pînă la $B=0,04$ T are loc o mărire a nivelului tensiunilor reziduale axiale de întindere pînă la 35%, iar pentru $B=0,06-0,1$ T se observă descreșterea acestui nivel, însă valorile tensiunilor reziduale rămân cu 16-24% mai mari, în comparație cu acele valori care se realizează la alierea fără utilizarea câmpului magnetic (vezi tabelul).

Așadar, rezultatele cercetărilor experimentale demonstrează, că câmpul magnetic în procesul ASE influențează substanțial caracterul distribuirii tensiunilor reziduale în straturile superficiale: micșorarea nivelului tensiunilor reziduale de întindere în straturile superficiale obținute prin ASE cu Ni și Cr în câmp magnetic, pentru valori ale inducției câmpului magnetic egale cu 0,06 T și 0,08 T, se explică prin manifestarea fenomenului oscilației intensității formării fazei martensitice sub acțiunea câmpului magnetic; la energii de descărcare de pînă la 3 J se formează o cantitate mare de fază martensitică și apar tensiuni reziduale de comprimare, cea ce confirmă că nivelul total ale tensiunilor reziduale este cu mult mai mic, decît la ASE în lipsa câmpului magnetic.

Concluzii:

- micșorarea nivelului tensiunilor reziduale de întindere în straturile superficiale obținute prin ASE cu Ni și Cr în câmp magnetic, pentru valori ale inducției câmpului magnetic egale cu 0,06 T și 0,08 T, se explică prin manifestarea fenomenului oscilației intensității formării fazei martensitice sub acțiunea câmpului magnetic;
- la energii de descărcare de pînă la 3 J, se formează o cantitate mare de fază martensitică și apar tensiuni reziduale de comprimare, fapt ce confirmă că nivelul total ale tensiunilor reziduale este cu mult mai mic decît la ASE în lipsa câmpului magnetic.

Bibliografie

1. Гитлевич А.Е., Михайлов В.В., Парканский Н.Я., Ревуцкий В.М. *Электроискровое легирование металлических поверхностей*. // Под ред. академика АН МССР Ю.Н. Петрова, Кишинев, Штиинца, 1985, с.195.
2. Игнатьков Д.А. *Остаточные напряжения в неоднородных деталях*, Кишинев, Штиинца, 1992.
3. Игнатьков Д.А. *К образованию остаточных напряжений при электроискровом легировании* // Электронная обработка материалов, Кишинев, 2001, №4, с. 9-14.

4. Mikhailov, V., Pasinkovsky, E., Grutsiuk, S., Volodina, G., Mîndrutsa, M., Pereteatcu, P. *Phase-structural transformations and rezidual stresses at carbon steelstrengthened by electrospark doping and electrolitic chemical heat treatment* // International Conference BALTTTRIB-99, 21-22 september 1999, Kaunas, Lithuania, 1999.
5. Бернштейн М.Л., Пустовой В.Н. *Термическая обработка стальных изделий в магнитном поле*, Москва. Машиностроение, 1989.

RESIDUAL PRESSURES IN SUPERFICIAL STRUCTURES CREATED BY ALLOYING WITH ELECTRIC SPARCS IN A MAGNETIC FIELD

Pavel Pereteatcu, Boris Ursan

(State University „Alec Russo”, Republic of Moldova)

The article deals with residual pressures in the superficial strata created through the alloyis with the electric sparks in the magnetic field. Experimental researches proved that due to certain values of magnetic induction, the general level of residual pressure is much smaller that in the case of alloyage with electric spark in the absence of the field.

Prezentat la redacție la 27.12.05

C.Z.U. 666.1.053

ПРИНЦИПЫ РАЗРАБОТКИ ТЕХНОЛОГИИ ТЕРМОМАГНИТНОЙ ОБРАБОТКИ ПРОМЫШЛЕННЫХ СТЕКЛОИЗДЕЛИЙ

Шарагов Василий

(Государственный университет им. А. Руссо, Республика Молдова)

Анализируются результаты лабораторных и производственных экспериментов по обработке стеклянной тары, бутылок из темно-зеленого стекла, рассеивателей из прозрачного бесцветного и молочного стекол, ампул из медицинского стекла и листового стекла постоянным, переменным и импульсным магнитными полями. Приводятся режимы терромагнитной обработки промышленных стекол. Показаны достоинства и недостатки метода обработки промышленных стеклоизделий электромагнитными полями. Обсуждаются принципы разработки технологии терромагнитной обработки промышленных стеклоизделий разного назначения.

Введение

Главным недостатком большинства видов стеклоизделий массового производства (стеклянной тары, листового стекла, сортовой посуды, ампул из медицинского стекла, светотехнических изделий и др.) является низкая механическая прочность. Ограничивают применение стекла слабая

термостойкость и недостаточная химическая стойкость. Плохие эксплуатационные свойства приводят к значительным потерям стекла при транспортировке и эксплуатации. Проблема обеспечения высокой эксплуатационной надежности промышленных стеклоизделий до сих пор не получила должного решения.

Методы повышения эксплуатационных свойств стекла можно условно разделить на два принципиально различных направления: 1) модификация структурно-химической природы стеклообразного тела с целью получения гомогенного высокомодульного состояния и структуры с повышенной склонностью к неупругой деформации; 2) изменение физико-химического состояния поверхности, направленное на подавление разупрочняющего действия поверхностных дефектов как концентраторов напряжений – и их удаление с поверхности, ее защита и изоляция дефектов покрытиями, блокирование дефектов сжатием поверхностного слоя [1].

Методы первого направления принципиально неприемлемы для промышленных стеклоизделий по технологическим и экономическим причинам. В разных странах на стекольных заводах нашли применение следующие способы упрочнения стеклоизделий, относящиеся ко второму направлению: термическая обработка, нанесение различного рода защитных покрытий, ионный обмен и его разновидности, выщелачивание поверхности химически активными газами, а также комбинации двух и даже трех способов.

Закалка стекла возможна при существенном изменении технологии производства и требует больших капитальных затрат. Подвергаются закалке только изделия простой формы. Для модификации поверхности стекла путем его обработки различными соединениями необходимо надежное оборудование для нанесения реагентов на изделия, при этом загрязняется окружающая среда. В силу перечисленных обстоятельств методы повышения эксплуатационных свойств промышленных стеклоизделий пока применяются ограниченно. Это побуждает к поиску новых методов упрочнения стекла.

В статье излагаются принципы разработки технологии термомагнитной обработки (ТМО) стеклоизделий массового производства с целью повышения их термомеханических свойств.

Результаты исследований и их обсуждение

При разработке и внедрении нового метода повышения эксплуатационных свойств промышленных стеклоизделий всегда возникают проблемы технологического, технического, эксплуатационного, экологического, экономического и организационного характера. Нами накоплен большой экспериментальный материал по исследованию взаимодействия неорганических стекол с электромагнитными полями, что позволяет сформулировать главные принципы для разработки ТМО промышленных стеклоизделий разного назначения.

Вначале рассмотрим наиболее важные экспериментальные данные.

В качестве объектов исследования применялись следующие образцы стекол и промышленные стеклоизделия: банки и бутылки из обесцвеченного стекла, бутылки из темно-зеленого стекла, рассеиватели и декоративные элементы из прозрачного бесцветного и накладного молочного стекла, листовое стекло и ампулы из прозрачного бесцветного медицинского стекла. Химические составы стекол приведены в таблице.

Химические составы промышленных стекол

Вид стекла	Содержание оксидов (массовая доля, %)								
	SiO ₂	Al ₂ O ₃	Fe ₂ O ₃	CaO	MgO	Na ₂ O	K ₂ O	SO ₃	Другие
Тарное	71,60	2,61	0,08	6,67	4,74	13,65	0,33	0,41	-
Прозрачное бесцветное	73,41	3,54	0,04	6,46	-	16,37	-	-	-
Молочное	68,90	6,47	0,03	4,15	-	18,24	-	-	2,49 F
Листовое	72,65	1,55	0,11	7,60	3,71	13,62	0,35	0,31	-
Медицинское	72,81	4,52	0,05	6,05	0,82	8,15	1,64	-	6,11 B ₂ O ₃

Эксперименты проводились в два этапа. Сначала в лабораторных условиях моделировались режимы ТМО стекол разных составов. В последующих исследованиях воздействию магнитных полей подвергались промышленные стеклоизделия в самом процессе их производства.

Наиболее важные параметры ТМО образцов стекла в лабораторных условиях: температура – 20...600 °С, длительность – 1...300 с, модуль вектора магнитной индукции (МВМИ) – до 0,5 Тл.

Лабораторные эксперименты показали, что механическая прочность ампул после воздействия импульсного магнитного поля возрастает на 10...20 %. Микротвердость промышленных стекол (см. таблицу), подвергнутых обработке постоянным, переменным и импульсным магнитными полями, повышается на 5...20 %.

В производственных условиях банки разной вместимости обрабатывались постоянным, переменным и импульсным магнитными полями. Главные параметры ТМО стеклоизделий: температура – 450...550 °С, длительность – 1...2 с, МВМИ – до 0,22 Тл. ТМО банок проводилась при стабильной работе секционного стеклоформирующего автомата IS-6-2. Воздействие магнитного поля на стекло визуально не изменяло его состояние. После отжига отбирались банки из одной и той же формы и испытывались на сопротивление усилию сжатия в направлении, перпендикулярном к стенкам корпуса, сопротивление внутреннему гидростатическому давлению, микротвердость и термостойкость. Для каждого режима обработки использовалось не менее 20 банок.

Испытания показали, что обработка постоянным магнитным полем повышает механическую прочность банок на 20...40%, при этом

минимальный уровень прочности возрастает в 1,5...2 раза. Следует отметить хорошую воспроизводимость полученных результатов.

Воздействие переменного и импульсного магнитных полей на тарное стекло также сопровождается упрочнением банок, однако достигаемый уровень (10...15%) ниже эффекта, получаемого при использовании постоянного магнитного поля.

Повышение температуры стекла (установки для создания магнитных полей располагались ближе к стеклоформирующей машине), увеличение длительности обработки (изделия повторно пропускались сквозь магнитное поле) и МВМИ благоприятствуют упрочнению банок.

Уровень упрочнения банок за счет терромагнитной обработки выше эффекта повышения прочности стеклотары путем нанесения защитных покрытий [2], термохимической обработки кислыми газами [3], электрохимическим выщелачиванием [4], но уступает упрочнению стекла закалкой [5] и ионным обменом [6].

Обработка банок электромагнитными полями сопровождается повышением микротвердости стекла на 5...10 %, что позволяет снизить потертость поверхности изделий при их выработке и транспортировке. Термостойкость обработанных банок возрастала на 5...8 %.

За счет повышения термомеханических свойств потери стеклоизделий на стадии выработки, транспортировки и эксплуатации снизятся в 2...4 раза, при этом можно уменьшить их массу на 5...10 % [2].

На основе производственных экспериментов установлена принципиальная возможность повышения механических характеристик изделий, вырабатываемых вручную. На АО «Фламинго-96» воздействию импульсного магнитного поля подвергались как свежееотформованные декоративные элементы из прозрачного бесцветного и накладного молочного стекла, так и пульки, которые после обработки раздувались в формах, а затем отжигались. Параметры магнитной обработки светотехнических изделий: температура – 450...900 °С, длительность – 1...4 с, МВМИ – 60...80 мТл, напряженность магнитного поля – 64 кА/м.

ТМО повышает на 5...10 % микротвердость и термостойкость светотехнических стекол. Как и в случае с обработкой банок, чем выше температура, значение МВМИ и больше длительность обработки, тем выше эффект в повышении микротвердости светотехнических стекол.

На основе многочисленных производственных испытаний и выпуска нескольких миллионов штук стеклотары с повышенными эксплуатационными свойствами сформулированы принципы, которыми следует руководствоваться при разработке технологии ТМО промышленных стеклоизделий разного назначения, отформованных машинным и ручным способами.

1. Технологические принципы:

- при ТМО технология производства стеклоизделий не изменяется, а также не снижается производительность машинных линий;

- выбор места для расположения установки в технологическом процессе выработки стеклоизделий, создающей электромагнитное поле, определяется с учетом обеспечения заданных эксплуатационных свойств стекла, удобства монтажа и эксплуатации установки для ТМО;
 - ТМО стекла проводится при максимально возможных температурах и продолжительности воздействия магнитных полей.
2. Технические принципы:
- гарантия обеспечения требуемых свойств и параметров стеклоизделий в соответствии с действующими стандартами;
 - оптимальные параметры магнитного поля включают высокие значения его МВМИ, напряженности и однородности;
 - установки для ТМО конструируются с наименьшими размерами индуктора или воздушного зазора сердечника в электромагните;
 - необходимости регулярного контроля за качеством ТМО стеклоизделий.
3. Эксплуатационные принципы:
- тепловая изоляция установки для ТМО от горячих стеклоизделий;
 - наличие технической документации по эксплуатации установки для ТМО стеклоизделий;
 - удобство и безопасность работы обслуживающего персонала.
4. Экологические принципы:
- минимальное воздействие ЭМП на обслуживающий персонал;
 - защита электронных аппаратов и оборудования от воздействия электромагнитных полей.
5. Экономические принципы:
- снижение себестоимости продукции;
 - высокая рентабельность и быстрые сроки самоокупаемости ТМО.
6. Организационные принципы:
- разработка рекомендаций и обучение персонала по устранению возможных неполадок в работе установки для ТМО;
 - обучение персонала соблюдению заданных режимов ТМО стеклоизделий и безопасному обслуживанию установки.
- Основные достоинства метода ТМО стекла – возможность упрочнения изделий сложной формы без изменения технологии их производства, сохранение естественного состояния поверхности стекла, при этом не загрязняется окружающая среда вредными веществами. Недостатками данного метода являются сложность в проектировании и изготовлении электромагнитных установок, эмпирический способ определения оптимального режима ТМО, малый ресурс безотказной работы установки, создающей импульсное магнитное поле.

Заключение

Разработаны технологические, технические, эксплуатационные, экологические, экономические и организационные принципы, которыми следует руководствоваться при разработке технологии ТМО промышленных стеклоизделий разного назначения.

Список литературы

1. Сильвестрович С. И. *Механические свойства стекла. Обзорная информация.*, Москва, ВНИИЭСМ, 1987, 70 с.
2. Гулоян Ю. А., Казаков В. Д., Смирнов В. Ф. *Производство стеклянной тары*, Москва, Легкая индустрия, 1979, 256 с.
3. Шарагов В. А. *Химическое взаимодействие поверхности стекла с газами*, Кишинев, Штиинца, 1988, 130 с.
4. Сытник Р. Д., Семенов Н. Н., Ботвинкин О. К. *О механизме упрочнения стекла методом электрохимической обработки в расплаве олова // Стекло и керамика*, Москва, 1978, № 8, с. 13-14.
5. Богуславский И. А. *Высокопрочные закаленные стекла*. Москва, Стройиздат, 1969, 208 с.
6. Бутаев А. М. *Прочность стекла. Ионнообменное упрочнение*, Махачкала, Дагестанский государственный университет, 1997, 253 с.

PRINCIPLES OF DESIGN OF THERMOMAGNETIC TREATMENT OF INDUSTRIAL GLASSWARE TECHNOLOGY

Vasilii Sharagov

(State University "Alecru Russo", Republic of Moldova)

The article presents the results of laboratory and industrial experiments with treatment of glass containers, bottles of green glass, scatters made of transparent colorless and milk glasses, ampoules made of medical glass and sheet glass by magnetic constant, alternative, and impulse magnetic fields. Regimes of the thermomagnetic treatment of industrial glasses are given here. The merits and limitations of the method of industrial glass treatment by magnetic impulse field are shown. The principles of design of technology of thermomagnetic treatment of industrial glassware for different purpose are discussed.

Prezentat la redacție la 24.11.06

Exigențe privind prezentarea lucrărilor științifice pentru revista „Fizică și tehnică: Procese, modele, experimente”

I. Destinația revistei

Materialele prezentate vor reflecta realizările obținute în ultimii ani în cadrul catedrelor, laboratoarelor de cercetări științifice ale USB, instituțiilor de învățământ și de cercetare din Republica Moldova și de peste hotarele ei.

II. Cerințe față de articolele prezentate

1. Dispoziții generale

Nu se vor admite pentru publicare materiale care au fost publicate în alte ediții. Articolele vor fi însoțite de extrasul din procesul verbal al ședinței de catedră, al laboratorului sau seminarului științific la care au fost discutate și propuse pentru publicare. Lucrările primite la redacție vor fi recenzate de specialiști calificați în domeniul respectiv, numiți de colegiul de redacție.

2. Structura lucrărilor și regulile de prezentare

O persoană poate fi autor sau/și coautor la maximum două articole. Volumul unui articol nu va depăși, ca regulă, 7 pagini.

Fiecare articol va cuprinde:

- CZU;
- titlul în limbile română /rusă și engleză;
- date despre autor/autori în limbile română/rusă și engleză;
- rezumatul în limbile română/rusă și engleză;
- articolul propriu-zis;
- bibliografie.

2.1. Întrebuințarea suportului electronic

Materialele vor fi redactate în **Microsoft Word**, fontul **Times New Roman** și vor fi prezentate pe foi în formatul B5 (257X182mm). Parametrii paginii: 25 - stînga (Left), 20 - sus (Top), 20 - jos (Bottom), 15 - dreapta (Right), 17,5 - antet (Header), 0 - subantet (Footer), orientarea portret. Dimensiunile fontului de imprimare - 12 points. Aliniatele – 1 cm. Spațiul dintre liniile (Line Spacing) aceluiași paragraf, inclusiv titlul lucrării și informațiile despre autori - un interval. Se va accepta cu trecerea cuvintelor dintr-un rînd în altul. Ultima pagină, în limita posibilităților, va fi completă.

2.2. Structura articolului

CZU se va situa în partea stîngă a paginii.

Titlul se va da complet, maximum 3 rînduri, pe toată lățimea paginii (14 points, BOLD, CENTER, ALL CAPS).

Informațiile despre autori se vor da cu aldine, în limba în care este scrisă lucrarea, în următoarea consecutivitate: Prenumele și Numele autorului (complet), afilierea. Dacă coautorii lucrării sînt angajații aceleiași instituții, denumirea ei se va da o singură dată.

Rezumatul va cuprinde descrierea succintă a obiectului, metodelor și rezultatelor cercetării și nu va depăși 10 rînduri. Mărimea caracterilor – 10 points. Cuvîntul „Rezumat” nu se va indica.

Introducerea va reflecta stadiul actual al cercetărilor în domeniu. În caz de necesitate, va cuprinde o scurtă analiză istorică. Introducerea se va încheia cu expunerea scopului lucrării.

Conținutul lucrării va include expunerea metodicii cercetării (experimentală sau teoretică), obiectul cercetării, echipamentul, metodele de măsurare și de observare, precizia și erorile metodicii experimentului. Se vor indica rezultatele obținute și analiza lor. Nu se va admite repetarea datelor în tabele, desene și texte.

În concluzii se va expune succint esența cercetării efectuate, relievăndu-se importanța și gradul de noutate a rezultatelor obținute.

Titlul fiecărui paragraf se va evidenția cu aldine. Titlurile de capitol vor fi separate de textul curent printr-un spațiu.

În fața textului fiecare titlu de subcapitol cu doi indici se lasă un spațiu liber de un rînd. Aliniatele se vor marca prin introducerea unui „<Tab>”. Pentru scoaterea în relief a unor concepte se vor folosi aldinele (**fără subliniere**).

Tabele se vor numerota cu cifre arabe în partea dreaptă, la sfîrșitul rîndului (de ex.: „Tabelul 1”), după care, în următorul rînd, va urma denumirea și tabelul propriu-zis. Tabelele vor fi separate de textul curent printr-un spațiu. Toate liniile ce formează coroaiajului tabelului vor avea aceeași grosime (1 points). În tabela textuală cifrele se vor scrie cu fontul 10 points, normal. Dacă textul va conține un singur tabel, acesta nu se va numerota.

Ilustrațiile (figurile, schemele, diagramele, fotografiile etc.) se vor prezintă în alb-negru, inserate în textul de bază sau pe foi aparte. Toate figurile se vor numerota cu cifre arabe (în ordinea apariției lor în lucrare), după care se va da legenda lor. Toate semnele sau marcările ilustrate se vor defini în legendă. În cazul mărimilor fizice, se vor indica unitățile de măsură. Dacă lucrarea va conține o singură figură, ea nu se va numerota. Figurile vor fi separate de textul curent printr-un spațiu. Fotografiile introduse în text se vor scana cu o rezoluție de minim 300 dpi (preferabil 600 dpi) și se vor prelucra pentru un contrast bun.

Nu se admite lipirea fotografiilor sau desenelor pe foi separate. Adnotările de pe figuri se vor face în cifre sau litere cu înălțimea caracterelor echivalentă fontului 10 points. Legenda se va culege cu 10 points.

Formule matematice. Toate formulele matematice se vor scrie, **ÎN MOD OBLIGATORIU**, cu editorul de ecuații din procesorul de texte Microsoft Word for Windows:95/, 97/, 98/, 2000, (Version 6.0/,Version 7.0, 2000) italicizate, centrat, prin culegerea fiecăreia din rând nou. Exigențele corespunzătoare vor urma imediat după formulă și se vor introduce prin „unde”, respectându-se ordinea semnelor din ecuație sau relație. Dacă textul va conține mai multe ecuații sau relații, acestea se vor numerota cu cifre arabe la sfârșitul rândului, în partea dreaptă a foii. După descifrarea simbolului-literă, se va pune virgula, apoi se va indica unitatea de măsură.

Unitățile de măsură ale mărimilor fizice se vor prezenta în sistemul internațional de unități (SI).

Bibliografia Termenul „Bibliografie” va fi separat de textul curent prin spațiu. În text, referințele se vor insera prin cifre încadrate între croșete, de exemplu: [2],[5-7], și se vor prezenta la sfârșitul articolului într-o listă aparte, în ordinea apariției lor în text. Referințele bibliografice se vor da în limba originalului. Nu se vor accepta referințe la surse nepublicate.

Referințele vor fi prezenta în modul următor:

- a) revistele și culegerile de articole: numele autorilor, titlul articolului, denumirea revistei (culegerii) cu paginile de început și sfârșit (ex.: Castro P. R- curve behavior of a struct ural steel //Engl. Fract. Mech.-1984.-V.19.-N2.-P341-357);
- b) cărțile: numele autorilor, denumirea completă a cărții, locul editării, anul editării, numărul total de pagini (de ex.: Матвеев А.Н Молекулярная физика: Учеб. для физ. Спец. вузов.-2-е изд., перераб. и доп.-М.:Высш. шк.,1987.-360с.);
- c) referințe la brevete (adeverințe de autor): în afară de autori, denumire și număr, se indică și denumirea, anul și numărul Buletinului de invenții în care a fost publicat brevetul (ex.: Nicolescu A. Robot indrustial// Brevet de invenție nr. 1344 MD. Publ- BOPI, nr.7,1996);
- d) în cazul tezelor de doctorat, referințele se dau la autoreferat, nu la teză (ex.: Bologna A. Generarea și utilizarea electroaerosolilor apoși/ Autoreferat al tezei de doctor habilitat în științe tehnice.- Chișinău,1998.-16p.).

3. Observații finale

Informația despre autori și rezumatele în alte limbi decât originalul se vor plasa după bibliografie. Conținutul rezumatului expus în trei limbi va fi identic.

Materialul cules se va prezenta pe dischetă, precum și într-un exemplar printat (cu contrastul bun) semnat de toți autorii (după bibliografie).

Pentru relații suplimentare se va indica adresa, numărul de telefon și E-mailul unuia dintre autori.

Articolele care nu vor corespunde cerințelor expuse, normelor limbii și stilului vor fi respinse.

Materialele prezentate la redacție nu se vor restitui autorului.

În revistă se publică articole științifice ce țin de următoarele domenii de cercetare:

- propagarea undelor de radio în diverse medii;
 - elaborarea dispozitivelor electronice analogico-numerice;
 - elaborarea laserilor și aplicarea lor în tehnologiile de prelucrare a materialelor;
 - studierea influenței factorilor exteriori asupra proprietăților fizice ale substanței;
 - tehnologii clasice și neconvenționale de prelucrare a materialelor.
-

The journal publishes scientific articles that cover the following research fields:

- radio-wave propagation in various media;
 - elaboration of analogo-numeric electronic devices;
 - elaboration of lasers and their application in materials processing technologies;
 - study of the influence of exterior factors on physical properties of substances;
 - classical and unconventional technologies of materials processing.
-

Журнал принимает к публикации работы, связанные со следующими областями научных исследований:

- распространение радиоволн в различных средах;
- разработка аналого-цифровых электронных устройств;
- разработка лазеров и их применение в технологии обработки материалов;
- изучение влияния внешних факторов на физические свойства веществ;
- классические и нетрадиционные технологии обработки материалов.

FIZICĂ ȘI TEHNICĂ:

Procese, modele, experimente

**Revistă științifică a profilului de cercetare
“Proprietățile fizice ale substanțelor în diverse stări”**