

Список литературы

1. Бекешев А., Васильченко Е., Даулетбекова А. и др. Радиационно-стимулированный выход примеси в междоузлия в кристаллах KBr-Li и KCl-Li // ФТТ. — 1996. — Т. 38. — № 3. — С. 769–778.
2. Бекешев А., Васильченко Е., Шункеев К., Эланго А. Стабилизация междоузельных радиационных дефектов в одноосносжатых при 80 К кристаллах KBr // ФТТ. — 1996. — Т. 38. — № 8. — С. 2394–2405.
3. Акилбеков А.Т., Васильченко Е.А., Сармуханов Е.Т. и др. Радиационное дефектообразование в пластически деформированном KBr // ФТТ. — 1991. — Т. 33. — № 3. — С. 868–873.
4. Vasilchenko E., Sarmukhanov E., Shunkeev K., Elango A. Electronic excitations in KBr and KI crystals near vacancy defects of different size // Phys. St. Sol. (b). — 1992. — Vol. 174. — P. 155–163.
5. Shunkeev K., Sarmukhanov E., Barmina A. et al. Specific Features of the Temperature Quenching of Luminescence of Self-Trapped Excitance in Alkali Halide Crystals under Low Temperature Deformation // Physics of the Solid State. — 2008. — Vol. 50. — № 10. — P. 1799–1802.
6. Смирнов И.А., Смирнов Б.И. Теплопроводность пластически деформированных кристаллов LiF // ФТТ. — 1968. — Т. 10. — № 1. — С. 307–310.
7. Рябых С.М., Бугаенко Л.Т. Модернизированная геометрическая модель кристаллов и ее применение в физике твердого тела // Изв. АН Латв. ССР. Сер. физ. и тех. наук. — 1990. — № 2. — С. 77.

УДК 542.91+546.65

Е.К.Жумадилов, З.Ф.Мурашова

Карагандинский государственный технический университет

ЭЛЕКТРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФЕРРИТОВ $\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$ (M — Mg, Ca, Sr, Ba)

Мақалада жаңа ферриттердің $\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$ (M — Mg, Ca, Sr, Ba) электрофизикалық қасиеттерін зерттеудің нәтижелері келтірілген. Электрөткізгіштіктің 300–400 К аралығындағы температураға тәуелділігі зерттелген. Барлық қосындыларда жарымылай өткізгіштік қасиеттің бар екендігі көрсетілді. Тәжірибелік көрсеткіштер бойынша есептелген қосындының тыйым салынған белдеулердің еңінің мәндері ұсынылды. Магний және стронций ферриттеріндегі тәжірибе нәтижесі бойынша электрөткізгіштіктің температураға тәуелділігі, ал кальций және барий ферриттерінде әсерлі температуралық аралықтардағы аномалдық эффектi байқалды.

In the work there are presented the results of studying electric-and-physical properties of new ferrites. There is studied the temperature dependence of electric conductivity in the range of 300 to 490 K. It is shown that all the compounds reveal semi-conductive properties. There are presented the calculated of the experimental data values of the width of the forbidden zone of the compounds considered. According to experimental data, there is no abrupt change in electrical conductivity depending on temperature in ferrites of magnesium and strontium, there are anomalous effects in ferrites of calcium and barium, in various temperature ranges.

В связи с открытием в последнее время веществ, обладающих одновременно сегнетоэлектрическими и ферро- или антиферромагнитными свойствами, следует ожидать дальнейшего расширения области применения сегнетоэлектриков [1, 2]. Для практики важно то, что в таких веществах диэлектрические, магнитные и другие свойства взаимосвязаны. На этой основе уже имеется ряд принципиально новых устройств и приборов, в которых электрическим полем управляют магнитные параметры и, наоборот, магнитное поле используется для управления электрическими параметрами.

Целью данной работы являлось исследование температурной зависимости электропроводности впервые синтезированных ферритов $\text{YbMFe}_2\text{O}_{5,5}$ (M — Mg, Ca, Sr, Ba) [3, 4], установление связи электропроводности со структурой соединений и энергией активации, анализ сегнетоэлектрических свойств.

Рентгенографическое исследование вышеуказанных ферритов в [3, 4] показали, что все соединения кристаллизуются в ромбической сингонии, причем с возрастанием ионного радиуса щелочноземельного металла от магния к барию наблюдается увеличение параметра c : $14,7 \text{ \AA} \rightarrow 15,13 \text{ \AA} \rightarrow 16,64 \text{ \AA} \rightarrow 17,16 \text{ \AA}$. Соответственно в этом же порядке возрастают объемы их элементарных ячеек: $104,24 \text{ \AA}^3 \rightarrow 112,93 \text{ \AA}^3 \rightarrow 122,08 \text{ \AA}^3 \rightarrow 126,59 \text{ \AA}^3$.

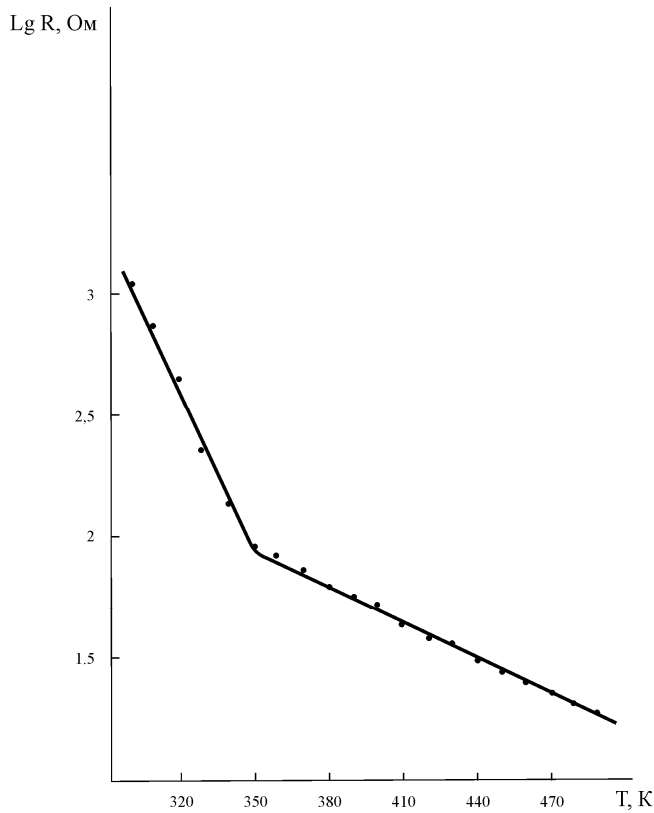


Рис. 1. Зависимость сопротивления от температуры для феррита магния $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$

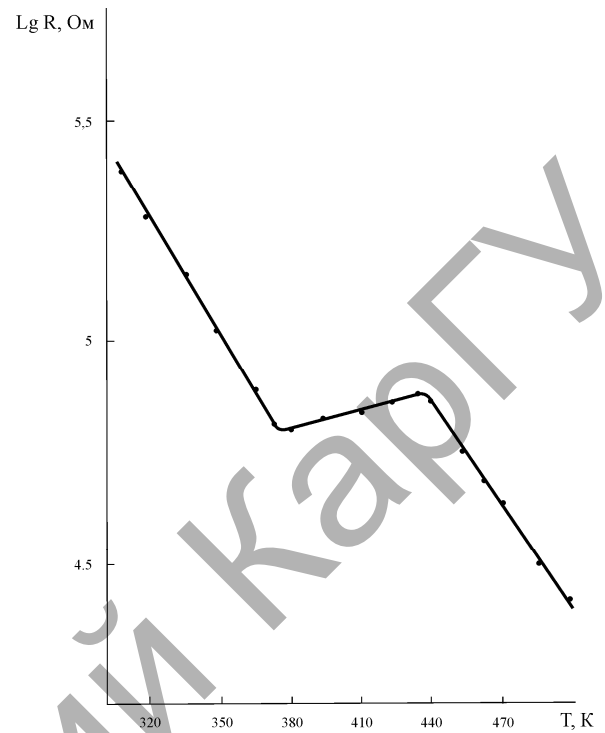


Рис. 2. Зависимость сопротивления от температуры для феррита кальция $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$

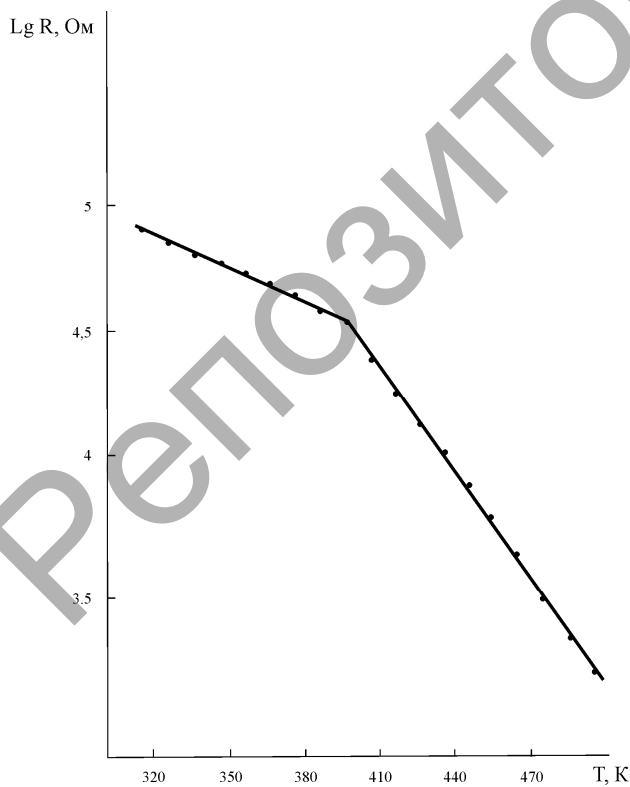


Рис. 3. Зависимость сопротивления от температуры для феррита стронция $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$

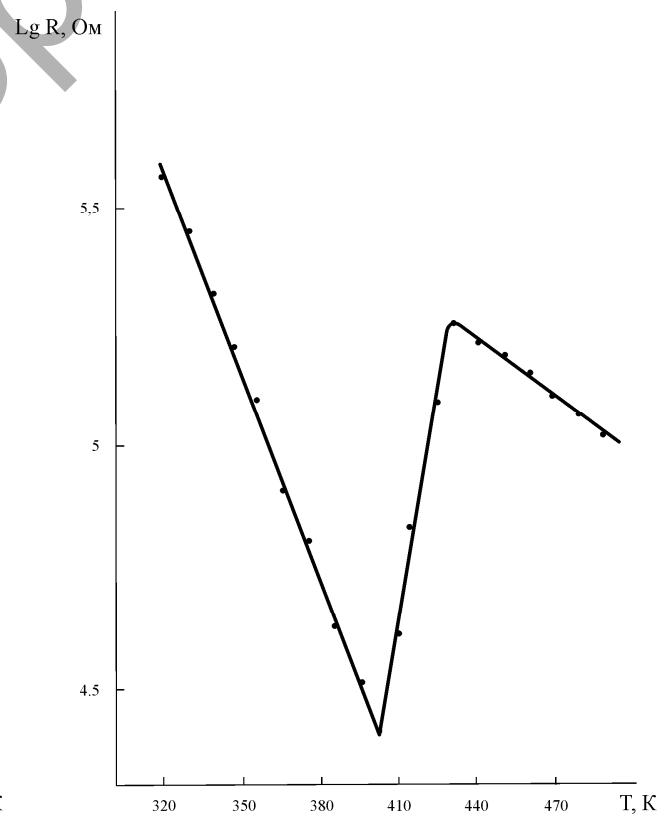


Рис. 4. Зависимость сопротивления от температуры для феррита бария $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$

Электрофизические измерения сопротивления проведены по двухэлектродной схеме в температурном интервале 300–490 К. Исследуемые образцы представляли собой плоскопараллельные пластинки в виде дисков, диаметром 10 мм, которые в последующем обжигали в печи с силитовыми нагревателями, электроды нанесены вжиганием серебряной пасты на всей рабочей поверхности. Нагревательное устройство для получения нужной температуры представляло собой специальную печь цилиндрической формы для равномерного нагрева рабочего объема, скорость нагрева составляла ~5 К/мин. Температура измерялась хромель-алюмелевой термопарой.

В связи с тем, что керамические материалы обладают определенной инерционностью, измерения электрофизических характеристик проводились после определенной предварительной выдержки при фиксированных температурах. Результаты электрофизических измерений представлены на рисунках 1–4.

В исходном состоянии (300 К) при одинаковых геометрических параметрах образцов сопротивление возрастает от феррита магния к ферриту бария. Электрофизические свойства коррелируют с изменением параметра c решеток, определенного рентгенофазовым анализом.

В процессе нагрева все образцы обнаруживают полупроводниковые электрофизические свойства: с увеличением температуры сопротивление уменьшается (увеличивается электропроводность).

Однако характер изменения электропроводности в зависимости от температуры у исследуемых образцов различный. Так, если для ферритов магния и стронция (рис. 1, 3) резких скачков изменения электропроводности в зависимости от температуры не наблюдается, то для ферритов кальция и бария в различных температурных интервалах отмечаются аномальные эффекты.

Следует отметить, что это эффект носит размытый характер, свойственный керамической технологии синтеза образцов. Эти аномальные эффекты можно отнести к фазовым переходам [5].

Для $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$ область аномального эффекта находится в интервале 370–430 К, для $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ — 400–430 К, что совпадает с термодинамическими исследованиями [3, 4].

При аномальном эффекте электропроводность с ростом температуры уменьшается (растет сопротивление), т.е. у образца проявляются металлические свойства. Для металлов в области средних и высоких температур сопротивление пропорционально абсолютной температуре

$$R_T = R_0 (1 + \alpha \Delta T), \quad (1)$$

где R_0 — сопротивление при начальных условиях; α — температурный коэффициент сопротивления; $\Delta T = T - T_0$.

Из последней формулы следует

$$\alpha = \frac{R_T - R_0}{R_0 \Delta T}. \quad (2)$$

Возрастание электрической проводимости полупроводников с увеличением температуры обусловлено ростом концентрации носителей тока. Нагрев приводит к перебросу электронов из валентной зоны в зону проводимости, т.е. росту носителей тока. Температурная зависимость электропроводности полупроводников задается соотношением

$$\sigma_T = \sigma_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{2kT}\right), \quad (3)$$

где σ_0 — проводимость при начальных условиях; ΔE — ширина запрещенной зоны; k — постоянная Больцмана.

Расчет ширины запрещенной зоны проводился следующим образом. Известно, что сопротивление определяется по формуле

$$R = \rho \frac{l}{S} = \frac{l}{\sigma S}, \quad (4)$$

где ρ — удельное сопротивление; l и S — длина и площадь поперечного сечения образца соответственно.

Подставив значение σ из выражения (3) в формулу для сопротивления (4), получим

$$R = \frac{l}{\sigma_0 S} \exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right). \quad (5)$$

Введя обозначение $R_0 = \frac{l}{\sigma_0 S}$, приведем формулу к виду

$$R = R_0 \exp\left(\frac{\Delta E}{2kT}\right). \quad (6)$$

Формула (6) лежит в основе одного из методов определения ширины запрещенной зоны полупроводников.

После логарифмирования последнего выражения приводим формулу (6) к виду

$$\ln R = \ln R_0 + \frac{\Delta E}{2kT}. \quad (7)$$

Последнее выражение для температур T_1 и T_2 и соответствующих им сопротивлений R_1 и R_2

$$\ln R_1 = \ln R_0 + \frac{\Delta E}{2kT_1}; \quad \ln R_2 = \ln R_0 + \frac{\Delta E}{2kT_2}. \quad (8)$$

Вычитая второе равенство из первого и исключая R_0 , получаем

$$\ln R_1 - \ln R_2 = \frac{\Delta E}{2k} \left(\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2} \right) = \frac{\Delta E (T_2 - T_1)}{2kT_1 T_2}. \quad (9)$$

Из последнего выражения получим ΔE

$$\Delta E = \frac{2kT_1 T_2}{T_2 - T_1} \ln \frac{R_1}{R_2} = \frac{2kT_1 T_2}{0,43(T_2 - T_1)} \lg \frac{R_1}{R_2}. \quad (10)$$

Рассчитанные по формуле (10) для линейных участков графиков зависимости $\lg R(T)$, значения ширины запрещенной зоны ΔE и по формуле (2) температурные коэффициенты сопротивления для аномальных участков приведены ниже.

Ширина запрещенной зоны ΔE для феррита кальция в области 300–360 К равна 2,2 эВ, в интервале 430–490 К — 2,5 эВ, температурный коэффициент сопротивления при 370–430 К $\alpha_t = +0,005 \text{ K}^{-1}$. Для образца $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ в области 300–400 К $\Delta E = 2,5$ эВ, в области 430–490 К $\Delta E = 0,8$ эВ, температурный коэффициент сопротивления при 400–430 К $\alpha_t = +0,19 \text{ K}^{-1}$.

Таким образом, до фазового перехода в указанных двух образцах ширина запрещенной зоны возрастает от феррита кальция к ферриту бария. Но если для феррита кальция после аномального скачка ширина запрещенной зоны становится больше (2,5 эВ), то для феррита бария, наоборот, ширина запрещенной зоны уменьшается от 2,5 до 0,8 эВ. Возможно, это связано с характером структурных изменений, так как для феррита кальция температурный коэффициент равен $+0,005 \text{ K}^{-1}$, тогда как для феррита бария — $0,19 \text{ K}^{-1}$.

Как отмечено в [5], по анализу температурной зависимости σ полупроводников и ее связи с энергией активации ΔE_A из уравнения $\sigma_T = \sigma_0 \exp(-\Delta E_A / 2kT)$ следует, что $\lg \sigma$ является в первом приближении линейной функцией обратной температуры, т.е. $\lg \sigma = f(10^4 / T)$. Очевидно, что на графике эта зависимость должна выражаться прямыми линиями в пределах, где $\Delta E_A = \text{const}$ и подвижность носителей заряда (электронов и дырок) $\mu = \text{const}$, что и наблюдается в первом приближении на рисунках 5, 6.

Рассчитанная величина энергии активации для $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$, $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ изменяется в незначительных пределах от 0,01 до 0,03 эВ, тогда как для $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$ и $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$ изменяется в 3,5 раза от 0,04 до 0,14 эВ и в высоко- и в низкотемпературной областях.

Таким образом, для ферритов $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$ и $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$ во всем исследованном интервале температур характер электропроводности является полупроводниковым, тогда как для ферритов $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$, $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ характер электропроводности меняется от полупроводникового к металлическому в определенном интервале температур.

Нами также были проведены исследования сегнетоэлектрических свойств $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$.

Сегнетоэлектриками, по определению, называется группа кристаллических диэлектриков, обладающих в определенном интервале температур самопроизвольной (спонтанной) поляризацией, которая сильно изменяется под влиянием внешних воздействий — электрического поля, деформации, изменения температуры. Поляризация сегнетоэлектрического образца во внешнем электрическом поле состоит, во-первых, в смещении границ доменов и росте размеров тех доменов, векторы электриче-

ских моментов которых близки по направлению к напряженности внешнего поля, и, во-вторых, в повороте электрических моментов доменов по полю. В достаточно сильном поле достигается состояние насыщения, когда весь образец однородно поляризован по полю и его поляризованность не изменяется при дальнейшем увеличении напряженности внешнего поля. Одной из самых важных отличительных характеристик сегнетоэлектриков является явление диэлектрического гистерезиса. Наличие петли гистерезиса, описывающей зависимость между электрической индукцией и напряженностью электрического поля на образце, обнаружено у исследуемого образца $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$.

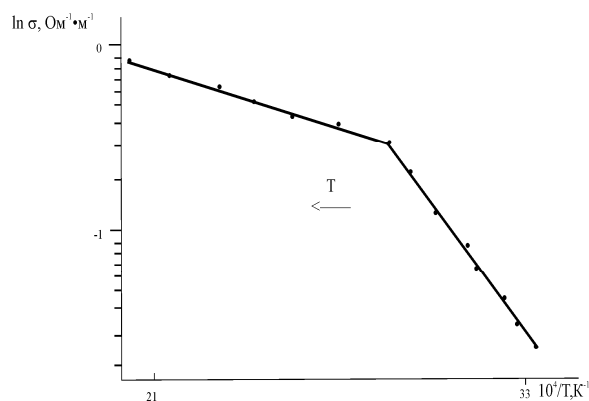


Рис. 5. Температурная зависимость электропроводности для $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$

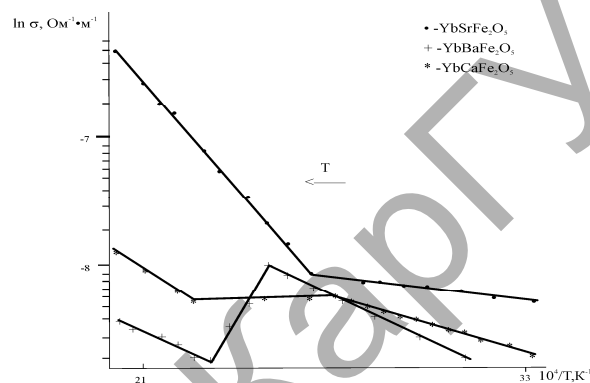


Рис. 6. Температурная зависимость электропроводности для $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$ (•); $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ (+), $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$ (*)

Наиболее распространенный способ получения зависимости электрической индукции от напряженности внешнего электрического поля $D(E)$ основан на схеме Сойера-Гауэра петли гистерезиса. Нами была получена хорошо наблюдаемая на осциллографе С1-83 петля гистерезиса феррита бария (рис. 7).

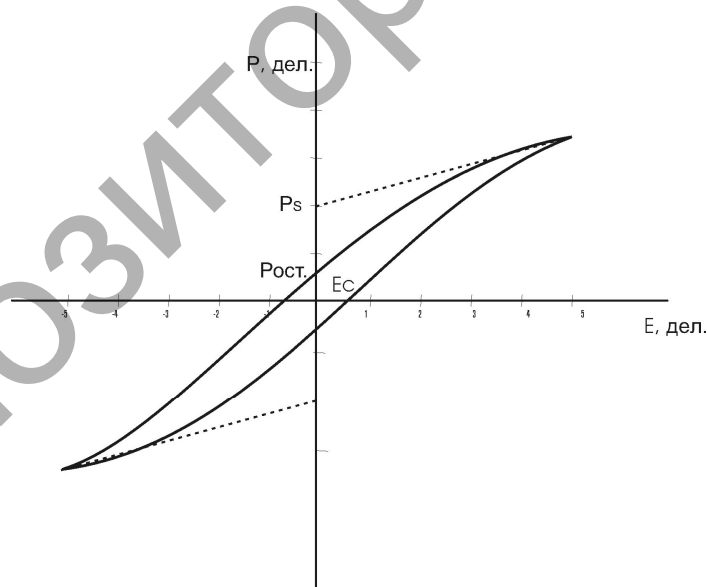


Рис. 7. Петля гистерезиса образца $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$

Таким образом экспериментально установлено, что исследуемый образец $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ обладает сегнетоэлектрическими свойствами.

Список литературы

1. Венецьев Ю.Н., Гагулин В.В., Любимов В.Н. Сегнетомагнетики. — М.: Наука, 1982. — 224 с.
2. Летюк Л.М. Химия и технология ферритов. — Л.: Химия, 1983. — 252 с.

3. Касенов Б.К., Толоконников Е.Г., Мустафин Е.С. и др. Синтез ферритов $\text{YbBaFe}_2\text{O}_{5,5}$ и $\text{YbSrFe}_2\text{O}_{5,5}$, их рентгенографические, термодинамические и электрофизические свойства // Журн. неорг. химии. — 2006. — Т. 51. — № 3. — С. 416.
4. Толоконников Е.Г., Мустафин Е.С., Касенова Ш.Б. и др. Синтез, рентгенографические и термодинамические свойства ферритов $\text{YbMgFe}_2\text{O}_{5,5}$ и $\text{YbCaFe}_2\text{O}_{5,5}$. // Журн. неорг. химии. — 2005. — Т. 50. — № 2. — С. 187.
5. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. — М.: Наука, 1978. — 791 с.

UDC 538.94

I.Kh.Zharekeshev

Al-Farabi Kazakh National University, Almaty

ITERATIVE CALCULATION OF ELECTRON WAVE FUNCTIONS IN QUANTUM NANOCCLUSERS

Электронның өзіндік функцияларын жаңа тиімді жолмен есептеп шығару ұсынылған. Үлкен көлемді реттелмеген нанокластерде кванттық сәттер зерттелген. Бұл үшін ретсіз қоспалы потенциалды Андерсонның моделі қолданылды. Электрондардың спектрі мен толқындық функциялары Ланцоштың итерациялық тәсілін қолдану арқылы есептеліп шығарылған. Бұл тәсілдің көлемі 100 Å электроникада эксперименталдық жағдайға жақындаудың мүмкіндігі дәлелденген.

Предлагается новое эффективное вычисление собственных функций электрона. Изучены квантовые состояния в неупорядоченных нанокластерах большого размера. Для расчетов используется модель Андерсона с хаотическим примесным потенциалом. Вычисление спектра и волновых функций электронов проводится методом итераций Ланцоша. Показано, что этот метод позволяет приблизиться к экспериментальной ситуации в нанoeлектронике с реальными размерами кластеров до 100 Å.

1. Introduction

The investigation of the conductivity of an electronic system of very small sizes corresponding to the dimensions of nanodevices belongs to the very heard of the modern condensed matter physics. The classical Drude theory of the electronic transport was built on the idea of free electrons scattered by positive ions located in sites of a metallic lattice. A crucial point of this approach was the mean free path, the average length an electron flies before it encounters a lattice ion. Therefore, the electron conductivity should be proportional to the mean free path, according to the classical theory of metals. This was established experimentally as being too large, i.e. around 100nm, meaning two orders of magnitude larger than the lattice constant. The wave character of an electron causes the electron to diffract from an ideal nanocrystal. Actually, the resistance appears only when electrons scatter from imperfections in a crystal, such as impurities, lattice shifts, dislocations, declinations etc. Since there is no perfect ideal crystal in the nature, the experimentalists mostly deal with the disordered samples. The main consequence is: the more the imperfections, the smaller the mean free path and the lower the conductivity. The question arises: will any increase in the degree of the lattice disorder lead to just a decrease of the mean free path and thus to a lower electronic conductivity? A half century ago P.Anderson has discovered that beyond a critical amount of disorder of impurity potential the diffusive motion of the electrons not only reduced, it can come to a complete stopping [1]. The electron becomes trapped by the disorder and the conductivity may vanish to zero. This is due to effects of quantum localization, resulting from the enhanced backscattering provided that the motion of the electron is phase-coherent (the phase of the wave function is preserved). This is a key concept for a metal-insulator transition, based on the quantum interference phenomena. The critical amount of potential disorder, at which the extended wave functions become suddenly localized, is called the critical disorder. Thus, the one-electron states in the presence of a random impurity potential can be localized in a finite range of space at the critical point of the metal-insulator transition.

The metal insulator transition is of particular interest from the viewpoint of studying the spatial structure of the wave functions and the statistical properties of the energy spectrum of the electrons. It was found that the correlations between the amplitudes of wave functions exactly at the critical point possess the uni-