

На правах рукописи

Шульгин Дмитрий Анатольевич



**ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И ДИНАМИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО СОЕДИНЕНИЯ CuAlO_2**

01.04.10 – Физика полупроводников

АВТОРЕФЕРАТ

**диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук**

Казань-2013

Работа выполнена в ФГБОУ ВПО «Казанский государственный энергетический университет», на кафедре «Физика»

Научный руководитель: Матухин Вадим Леонидович
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБОУ ВПО «Казанский государственный
энергетический университет», зав. кафедрой
«Физика»

Официальные оппоненты: Уланов Владимир Андреевич
доктор физико-математических наук, профессор,
ФГБОУ ВПО «Казанский государственный
энергетический университет», профессор кафедры
«Промышленная электроника»

Тогулев Павел Николаевич
кандидат физико-математических наук,
ФГБУН «Казанский физико-технический
институт им. Е.К. Завойского» Казанского
научного центра Российской Академии наук,
ведущий инженер группы наносистем для
водородной энергетики

Ведущая организация: ФГБОУ ВПО «Казанский национальный
исследовательский технический университет
им. А.Н. Туполева – КАИ»

Защита состоится 27 декабря 2013 г. в 14 час. 30 мин. на заседании
диссертационного совета Д 212.082.01 на базе ФГБОУ ВПО «Казанский
государственный энергетический университет» по адресу: 420066, г. Казань,
ул. Красносельская, 51. Тел./Факс (843)562-43-30.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения,
просим направить по адресу: 420066, г. Казань, ул. Красносельская, 51, КГЭУ,
Ученому секретарю диссертационного совета Д 212.082.01

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке Казанского
государственного энергетического университета, с авторефератом – на сайтах
<http://vak.ed.gov.ru> и <http://www.kgeu.ru>

Автореферат разослан « 22 » ноября 2013г.

Ученый секретарь
диссертационного совета, д.ф.-м.н.



Калимуллин Рустем Ирекович

Актуальность работы

Полупроводниковое соединение CuAlO_2 входит в группу прозрачных проводящих оксидов (ППО) с электрической проводимостью p-типа. Проявляемый в последнее время активный интерес к этой группе соединений, имеющих химическую формулу CuMO_2 , где М – трехвалентный металл (Al, Ga, Sc, Y, Cr), связан, прежде всего, с перспективой их практического применения во многих технических устройствах, в том числе и в качестве термоэлектрических материалов.

Поскольку электрическая энергия является наиболее удобной и универсальной формой энергии, то поиск и разработка наиболее эффективных методов ее получения имеют особое значение. Большое внимание было обращено в этой связи на твердотельные термоэлектрические преобразователи энергии (ТПЭ), которые имеют целый ряд преимуществ перед традиционными электрическими генераторами. К этим преимуществам относятся простота конструкции, отсутствие движущихся частей, бесшумность работы, высокая надежность, возможность миниатюризации без потери эффективности. ТПЭ используются и в экологически чистых холодильных агрегатах, поскольку преобразование энергии с их помощью возможно в обоих направлениях. Теория термоэлектрического преобразования энергии с помощью полупроводниковых термоэлементов была впервые разработана школой выдающегося советского ученого – физика академика А.Ф. Иоффе более полувека тому назад, она положила начало активному энергетическому применению термоэлектричества [1].

Однако, несмотря на известные преимущества термоэлектрического преобразования энергии, ему присущ серьезный недостаток – относительно низкая эффективность. Для широких применений ТПЭ необходимо существенное повышение их эффективности, но многолетние попытки ее увеличения пока не привели к принципиальному прорыву [2, 3]. Поэтому предстоит еще большая работа, прежде чем удастся создать материалы с высокой величиной термоэлектрической добротности, необходимой для широких практических применений. При этом основная роль отводится физическим исследованиям, потому что, в первую очередь, важно понять

микроскопические свойства термоэлектрических материалов. Понимание этих свойств является условием направленного поиска новых материалов, необходимых для разработки более эффективных ТПЭ. Среди физических методов исследования метод ядерного квадрупольного резонанса (ЯКР) занимает особое место, поскольку является одним из наиболее эффективных методов изучения электронного строения, дефектной структуры и динамических характеристик кристаллов. Таким образом, все вышесказанное свидетельствует об актуальности темы диссертационной работы.

Объект исследования: образцы полупроводникового соединения CuAlO_2 .

Предмет исследования: особенности электронной структуры и динамические свойства полупроводникового соединения CuAlO_2 .

Метод исследования: импульсный метод ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$.

Цель диссертационной работы состояла в экспериментальном исследовании особенностей электронной структуры и динамических свойств полупроводникового соединения CuAlO_2 импульсным методом ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$.

Для достижения поставленной в работе цели решались следующие задачи.

1. Получение (методом твердофазного синтеза), определение структуры и термическая обработка приготовленных образцов полупроводникового соединения CuAlO_2 .

2. Проведение сравнительных экспериментальных исследований спектральных параметров ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ (частота, форма, ширина спектральных линий) в образцах соединения CuAlO_2 с целью выявления особенностей его дефектной структуры.

3. Выполнение ЯКР ^{63}Cu нутационных измерений для экспериментального определения параметра асимметрии тензора градиента электрического поля (ГЭП) в месте расположения резонансных ядер меди в соединении CuAlO_2 .

4. Изучение температурной зависимости частоты ЯКР ^{63}Cu в соединении CuAlO_2 для получения сведений о динамических свойствах кристаллической решетки.

Научная новизна диссертационной работы заключается в следующем.

1. Определено влияние метода твердофазного синтеза и термической обработки на электронную структуру поликристаллических образцов полупроводникового соединения CuAlO_2 .

2. Определены спектральные параметры ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$, форма и ширина резонансных линий в полученных образцах полупроводникового соединения CuAlO_2 .

3. Изучены особенности температурной зависимости частоты ЯКР ^{63}Cu в полупроводниковом соединении CuAlO_2 .

4. Выполнена оценка по методике нутационного ЯКР параметра асимметрии тензора ГЭП (η) в месте расположения резонансных ядер меди в соединении CuAlO_2 .

Достоверность полученных результатов определяется тем, что они получены с помощью надежных современных методик, хорошо воспроизводятся и подтверждаются соответствием экспериментальных данных результатам теоретических расчетов, а также имеющимся литературным данным для родственных соединений.

Научная и практическая значимость полученных результатов определяется применением прозрачных проводящих оксидов в термоэлектричестве, оптоэлектронике и полупроводниковой гелиоэнергетике. Полученные в диссертации результаты важны как для более глубокого понимания физических процессов, происходящих в исследованном соединении, так и для развития теории ядерных квадрупольных взаимодействий в полупроводниковых кристаллах.

На защиту выносятся следующие результаты.

1. Обработка поликристаллических образцов полупроводникового соединения CuAlO_2 , полученных методом твердофазного синтеза, термическим отжигом при низких температурах или путем длительного хранения приводит к заметному уменьшению структурных дефектов кристаллов.

2. Спектральные параметры ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ и, в первую очередь, форма и ширина резонансных линий позволяют определять состояние электронной структуры приготовленных образцов полупроводникового соединения CuAlO_2 . Форма спектральных линий становится более симметричной и четкой в

термически обработанных образцах, в то время как широкие линии спектра отражают заметное разупорядочение и наличие собственных структурных дефектов в свежеприготовленных образцах соединения CuAlO_2 .

3. Экспериментально определено значение параметра асимметрии тензора градиента электрического поля (ГЭП) в месте расположения резонансных атомов меди (η) в соединении CuAlO_2 способом регистрации модуляции огибающей сигналов спинового эха ЯКР ^{63}Cu . Полученная аксиальная симметрия тензора ГЭП ($\eta = 0$) указывает на однородное электронное распределение в слоях одновалентной меди (Cu^{1+}) в кристаллической структуре этого соединения.

4. Полученная экспериментальная температурная зависимость частоты ЯКР ^{63}Cu в полупроводниковом соединении CuAlO_2 описывается моделью изгибных деформационных колебаний с частотой решеточных колебаний около $\omega_{\text{реш}} = 150 \text{ см}^{-1}$.

Личный вклад. Автором внесен определяющий вклад в получение основных экспериментальных результатов от приготовления образцов и проведения измерений до анализа экспериментальных результатов с применением специальных программ по расчёту параметров спектров ЯКР. Обсуждение и анализ результатов проводились совместно с научным руководителем работы.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на 14-м Международном форуме по термоэлектричеству (Москва, 2011), 14-й Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто- и наноэлектронике (Санкт-Петербург, 2012), VI и VII Молодежной международной научной конференции «Тинчуринские чтения» (Казань, 2011, 2012), XVIII Всероссийской конференции «Структура и динамика молекулярных систем» (Яльчик, 2012), XVI Аспирантско-магистерском научном семинаре, посвященном «Дню энергетика» (Казань, 2012), 1-й Всероссийской научной конференции «Наноструктурированные материалы и устройства для солнечных элементов 3-го поколения» (Чебоксары, 2013).

Публикации. Основное содержание диссертации опубликовано в 2 научных статьях в журналах, входящих в перечень ВАК, и в 4 материалах докладов международных и всероссийских конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы, включающего 79 наименований. Работа изложена на 110 страницах машинописного текста, содержит 29 рисунков и 1 таблицу.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении кратко обосновываются выбор темы исследования и ее актуальность, определяется основная цель диссертационной работы и ее задачи. Кратко излагается содержание работы и перечисляются основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе выполнен литературный обзор по теме диссертационной работы. В этой главе кратко описаны как история открытия термоэлектрических явлений, так и сами термоэлектрические эффекты. Представлены основные результаты изучения физических свойств термоэлектрических материалов и показана связь между их макроскопическими и микроскопическими параметрами. В этой же главе рассмотрены основные направления современных исследований по повышению термоэлектрической добротности полупроводниковых материалов.

Во второй главе рассмотрена методика эксперимента. Приведены результаты работы по получению образцов полупроводникового соединения CuAlO_2 с использованием метода твердофазного синтеза, определению кристаллической структуры, обработке и подготовке образцов к измерениям. Приводится описание экспериментальной аппаратуры – многоимпульсного ЯКР спектрометра Tecmag–Redstone, на котором были выполнены эксперименты по измерению спектральных и релаксационных параметров ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$. Описаны импульсные методики измерения параметров спектров ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ и в этой же главе дано описание азотного потокового криостата, используемого в низкотемпературных измерениях.

Третья глава посвящена результатам экспериментального исследования спектров ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ в синтезированных образцах полупроводникового соединения CuAlO_2 . Кристаллическая структура соединений CuMO_2 ($M - \text{Al}, \text{Ga}, \text{In}, \text{Y}, \text{Sr}$) состоит из чередующихся слоев Cu^{1+} (ab - плоскость) и октаэдров MO_6 , ориентированных вдоль оси c кристалла. Каждый ион Cu^{1+} оказывается дважды координированным с атомами кислорода, образуя структуру O-Cu-O , которая связывает октаэдры MO_6 (рис. 1). Слоистая структура уменьшает $\text{Cu} - \text{Cu}$

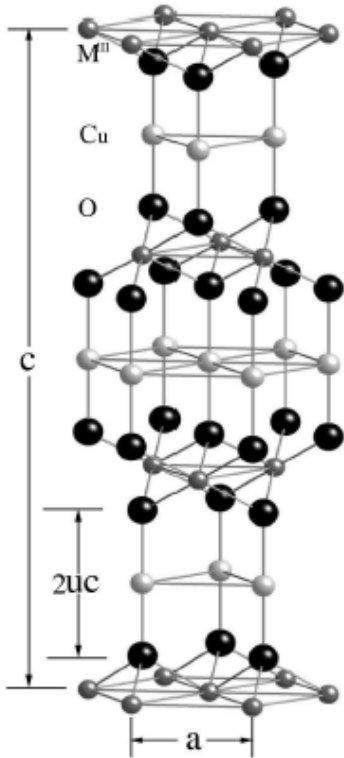


Рис. 1. Кристаллическая 3R структура CuAlO_2 .

и увеличивает ширину запрещенной зоны (энергетической щели) ($E_g = 3.5$ эВ) относительно одновалентного оксида Cu_2O , который также относится к полупроводникам p -типа, но является изотропным полупроводником со значением энергетической щели $E_g = 2.1$ эВ. Такая особенность кристаллической структуры соединения CuAlO_2 приводит к анизотропным транспортным и оптическим свойствам материала. Ожидается, что слои из ионов меди Cu^{1+} будут являться основным проводящим каналом, а более ограниченная проводимость носителей заряда будет существовать в направлениях, перпендикулярных этим слоям [4]. Известно, что оба изотопа меди имеют ядерный спин $I = 3/2$, и для каждого из них единственная частота ЯКР определяется следующим выражением [5]:

$$\nu = (e^2 Q q_{zz} / 2h) (1 + \eta^2 / 3)^{1/2}, \quad (1)$$

где eQ — ядерный электрический квадрупольный момент, $q_{zz} = V_{zz}$ — наибольшая компонента (z -компонента) тензора градиента электрического поля (ГЭП) в системе его главных осей x, y, z , $\eta = (V_{xx} - V_{yy}) / V_{zz}$ — параметр асимметрии тензора ГЭП.

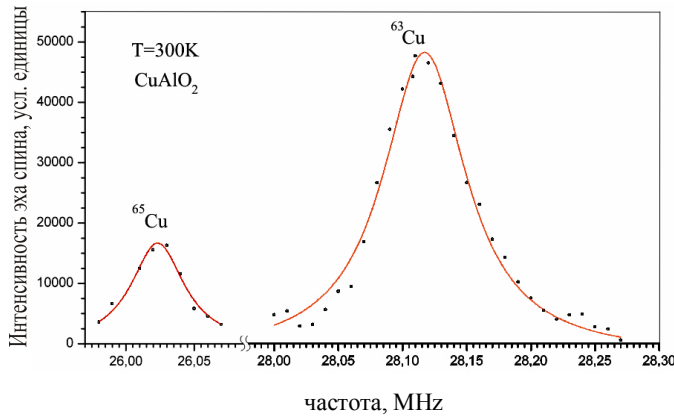


Рис. 2. Спектр ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ соединения CuAlO_2 ($T=300\text{K}$)

0.45). Оба изотопа меди имеют различные гиромагнитные отношения γ_N и квадрупольные моменты Q ($\gamma_N = 7.11 \cdot 10^{-7}$ и $7.60 \cdot 10^{-7} \text{ rad} \cdot \text{s}^{-1} \text{ T}^{-1}$, а $Q = -22 \cdot 10^{-30}$ и $-20,4 \cdot 10^{-30} \text{ m}^2$ для ^{63}Cu и ^{65}Cu , соответственно) [6]. Отношение резонансных частот изотопов меди оказалось равным:

$$^{63}v_Q / ^{65}v_Q = ^{63}Q / ^{65}Q = 1.08, \quad (2)$$

что прямо подтверждает ЯКР происхождение наблюдаемых сигналов спинового эха. Полученный спектр ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ в исследованном температурном диапазоне (77-340 K) соответствуют единственной кристаллографической позиции атомов меди в кристаллической структуре соединения CuAlO_2 и согласуется с результатами работы [7].

При детальном исследовании формы резонансных ЯКР линий обнаружен их асимметричный характер с более пологим спадом в области высоких частот, причем наименьшая асимметрия получена

для стехиометрического образца №4, выдержанного длительное время при низкой температуре, и образца с дефицитом атомов меди (образец №3). В

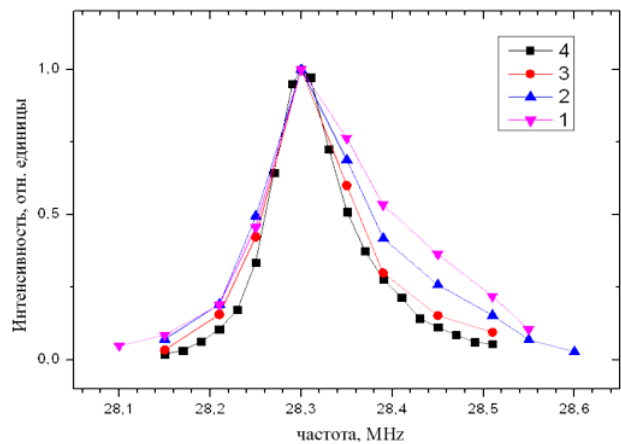


Рис. 3. Форма резонансной линии ЯКР ^{63}Cu в образцах 1–4 полупроводникового соединения CuAlO_2 ($T = 77\text{K}$).

области температур 77-297 К асимметричная форма линий ЯКР ^{63}Cu в исследованных образцах не претерпевала каких-либо изменений (рис. 3).

Полученные в эксперименте формы линии ЯКР ^{63}Cu можно представить в виде суммы двух линий гауссовой формы Cu-1 и Cu-2:

$$A(\nu) = A_1 \exp[-(\nu - \nu_1)^2 / 2\sigma_1^2] + A_2 \exp[-(\nu - \nu_2)^2 / 2\sigma_2^2], \quad (3)$$

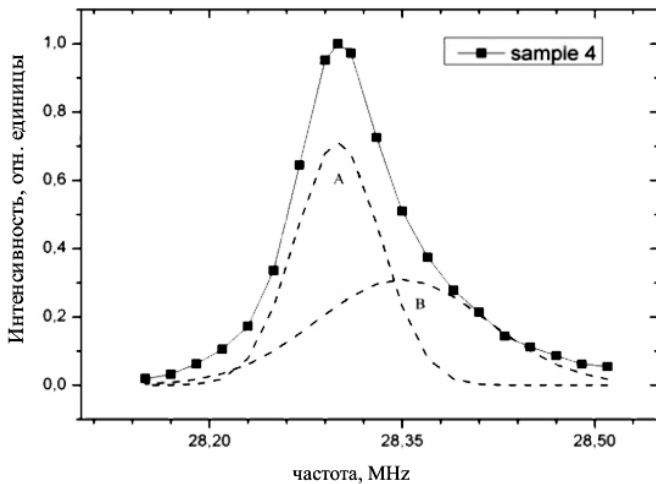


Рис. 4. Форма резонансной линии ЯКР ^{63}Cu в образце №4. Точки — эксперимент, штриховая линия — разложение спектра на гауссовы кривые.

где амплитуды A_1 , A_2 , ширины линий σ_1 , σ_2 , частоты ν_1 и ν_2 определялись численной обработкой экспериментальных данных. В качестве примера разложение спектральной линии ЯКР ^{63}Cu ($T=297$ К) для образца №4 показано на рис. 4. Для указанных параметров

получены следующие значения:
 $A_1 = 0.81 \pm 0.01$, $A_2 = 0.2 \pm 0.02$,
 $\nu_{01} = (28.3 \pm 0.01)$ МГц,

$\nu_{02} = (28.35 \pm 0.02)$ МГц, $\sigma_1 = (0.04 \pm 0.001)$ МГц, $\sigma_2 = (0.08 \pm 0.002)$ МГц. Таким образом, можно выделить узкую низкочастотную линию и широкую высокочастотную линию, обусловленную резонансными центрами, расположенными в сравнительно более разупорядоченных областях кристаллической структуры. Такие области могут быть связаны с остаточными напряжениями и дефектами упаковки в системе политипов кристалла. Эксперимент показал, что в свежеприготовленном стехиометрическом образце №1 линия Cu-2 имеет наибольшую ширину, а в стехиометрическом образце №4, который хранился длительное время при комнатной температуре, наблюдается узкая линия ЯКР ^{63}Cu . На этом основании можно сделать вывод, что именно низкотемпературный отжиг кристалла снижает до минимума концентрацию такого рода структурных дефектов. Составляющую спектральной ЯКР линии Cu-1 можно отнести к сравнительно более упорядоченным структурным областям и предположить, что ширина этой линии, которая одинакова для всех исследованных образцов, обусловлена

собственными дефектами соединения CuAlO_2 . Такими дефектами могут быть, например вакансии в структурных позициях атомов меди – V_{Cu} . С существованием таких дефектов связывается дырочная проводимость соединения CuAlO_2 [7]. Следует отметить, что относительная интенсивность этих двух компонент, характеризующая доли высокочастотной и низкочастотной (разупорядоченной) фаз, оставалась для всех образцов постоянной в исследованном температурном диапазоне.

В четвертой главе приведены результаты изучения ядерного квадрупольного взаимодействия в соединении CuAlO_2 . Для случая ядерного спина $I = 3/2$ измерение одной резонансной ЯКР частоты не позволяет отдельно определить два параметра, характеризующих ядерное квадрупольное взаимодействие: $Q_{\text{CC}} = e^2Qq/h$ – константу ядерного квадрупольного взаимодействия и η – параметр асимметрии тензора ГЭП.

Обычно измерения параметра η проводятся с помощью наложения внешнего магнитного поля, т.е. исследования в ЯКР эффекта Зеемана. Однако в соединении CuAlO_2 спектральные линии ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ – сравнительно широкие (~ 100 кГц), что не позволяет использовать эффект Зеемана. Для определения параметра асимметрии нами была использована методика нутационного ЯКР с применением программы возбуждения сигналов спинового эха с одновременным варьированием длительностей первого и второго радиочастотных импульсов [8, 9]. При этом отношение длительности второго импульса к длительности первого оставалось постоянным и равным двум ($t_2 = 2t_1$) при фиксированном интервале (τ) между радиочастотными импульсами. Интенсивность сигналов ЯКР эха в этой программе для случая поликристалла определяется следующим выражением:

$$E(t_1, \omega_1, \eta) = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin\theta [\omega_n \sin^3(\omega_n t_1)] d\theta d\varphi, \quad (4)$$

где ω_n — частота нутации, t_1 — длительность первого радиочастотного импульса, θ и φ — полярный и азимутальный углы вектора магнитного поля H_1 в системе главных осей тензора ГЭП.

В качестве примера на рис. 5 изображен экспериментально наблюдаемый эффект модуляции интенсивности сигнала спинового эха в нутационном ЯКР

^{63}Cu в образце № 4, где экспериментальные точки нанесены с интервалом 2 мкс ($T = 297\text{K}$), на них наложена теоретическая кривая, рассчитанная по приведенной формуле для величины параметра асимметрии $\eta = 0.02$.

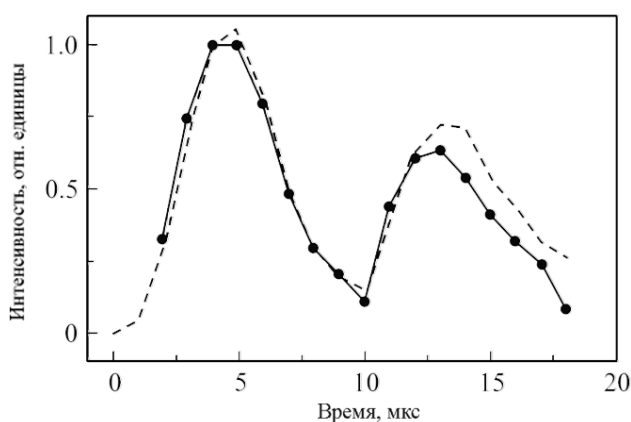


Рис. 5. Зависимость интенсивности спинового эха ядер ^{63}Cu в образце №4 соединения CuAlO_2 от длительности радиочастотных импульсов при фиксированном интервале между ними.

Аналогичные значения параметра асимметрии характерны и для других образцов. Таким образом, полученные результаты указывают на аксиальную симметрию тензора ГЭП в месте расположения ядер меди в соединении CuAlO_2 и подтверждают вывод о зарядовой однородности слоев одновалентной меди Cu^{1+} (ab - плоскость) в кристаллической структуре этого соединения.

В образце полупроводникового соединения CuAlO_2 нами была исследована температурная зависимость единственной частоты ЯКР $\nu_Q(^{63}\text{Cu})$ и ширины линии $-\Delta\nu_Q(^{63}\text{Cu})$.

Результаты измерений температурных зависимостей частоты ЯКР ^{63}Cu $\nu_Q(T)$ (переход $\pm 1/2 \leftrightarrow \pm 3/2$) в полупроводниковом соединении CuAlO_2 , проведенных нами в области температур 77 – 385 К, представлены на рис. 6.

В исследованном температурном диапазоне мы не обнаружили каких-либо скачков или изломов на экспериментальных кривых $\nu_Q(T)$, что может указывать на отсутствие в этом диапазоне температур фазовых переходов. Ширина линии также оставалась без каких-либо изменений. Согласно теории Байера, уменьшение частоты ЯКР $\nu_Q(T)$ с увеличением температуры объясняется усреднением ГЭП под воздействием

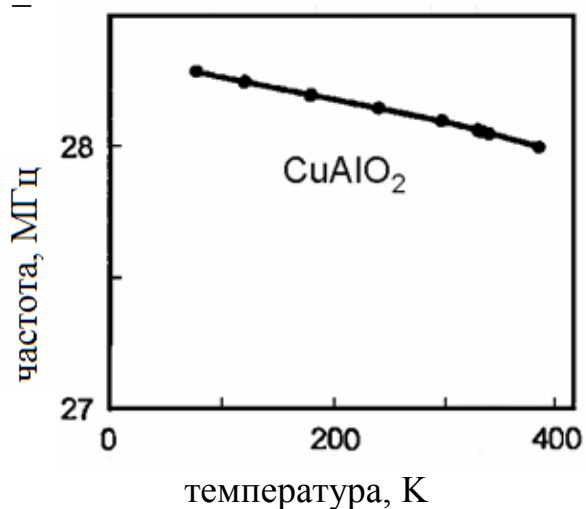


Рис. 6. Температурная зависимость резонансной частоты ЯКР ^{63}Cu для полупроводникового соединения CuAlO_2

тепловых колебаний кристаллической решетки, амплитуда которых возрастает при увеличении температуры.

Для описания температурной зависимости частоты ЯКР ^{63}Cu $\nu_Q(T)$ в CuAlO_2 нами была использована модель изгибных деформационных колебаний иона меди перпендикулярно оси цепочки O-Cu-O. При этом изгибные колебания можно рассматривать как крутильные колебания Cu – O. Для аппроксимации экспериментальных данных $\nu_Q(T)$ мы применили формулу Кушиды-Байера [10]: $\nu_Q(T) = \nu(0)(1 - 3/2kT/J\omega^2)$, для одной моды с частотой решеточных колебаний ω , где J – момент инерции медно-кислородной цепочки O–Cu–O относительно оси качания ($J = 9.1 \cdot 10^{-46} \text{ кг} \cdot \text{м}^2$ [11]). Полученное значение частоты решеточных колебаний $\omega = 150 \text{ см}^{-1}$ лежит в диапазоне обнаруженных методом рамановской спектроскопии низкочастотных колебаний в кристаллах CuAlO_2 [12]. Выполненные оценки показывают, что модель изгибных деформационных колебаний ионов меди перпендикулярно оси симметрии медно-кислородных цепочек O–Cu–O хорошо описывает экспериментальные результаты в температурном диапазоне 77 - 400 К.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Методом твердофазного синтеза отработаны способы приготовления образцов полупроводникового соединения CuAlO_2 . Рентгенофазовый анализ полученных образцов показал, что основная фаза является преимущественно ромбоэдрической модификацией (3R) с параметрами кристаллической решетки $a = 2.87 \text{ \AA}$, $c = 17 \text{ \AA}$. Обработка приготовленных образцов низкотемпературным отжигом или длительным хранением приводит к уменьшению степени дефектности образцов.

2. Проведено сравнительное исследование спектров ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ в образцах полупроводникового соединения CuAlO_2 . Полученные спектральные параметры ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ (форма и ширина резонансных линий изотопов) являются прямыми характеристиками “электрической однородности” образцов, они позволяют непосредственно контролировать дефектность приготовленных образцов полупроводникового соединения CuAlO_2 . Форма спектральных линий становится более симметричной и четкой в обработанных образцах, в то время

как широкие линии спектра отражают значительный разброс ГЭП, вызванный существованием собственных структурных дефектов в свежеприготовленных образцах соединения CuAlO_2 .

3. По методике нутационного ЯКР с применением программы возбуждения сигналов спинового эха с одновременным варьированием длительностей первого и второго радиочастотных импульсов проведены измерения параметра асимметрии тензора градиента электрического поля. Полученные результаты указывают на аксиальную симметрию тензора ГЭП в месте расположения ядер меди ($\eta = 0$) в соединении CuAlO_2 и свидетельствуют о зарядовой однородности проводящих слоев одновалентной меди Cu^{1+} в кристаллической структуре этого соединения.

4. Проведены детальные исследования температурной зависимости частоты и ширины линии ЯКР ^{63}Cu в полупроводниковом соединении CuAlO_2 в диапазоне температур 77 – 385 К. Показано, что модель изгибных деформационных колебаний ионов меди перпендикулярно оси симметрии медно-кислородных цепочек $\text{O}-\text{Cu}-\text{O}$ сравнительно хорошо описывает экспериментальные результаты. В рамках этой модели была выполнена оценка частоты деформационных решеточных колебаний $\sim 150 \text{ см}^{-1}$. В исследованном температурном диапазоне 77 – 385 К в температурных зависимостях частоты и ширины линии ЯКР ^{63}Cu не было обнаружено каких-либо особенностей (уширения спектральных линий, скачков или изломов в температурной зависимости частоты ЯКР ^{63}Cu), что указывает на отсутствие в полупроводниковом соединении CuAlO_2 в исследованном температурном диапазоне фазовых переходов.

Основные результаты диссертации изложены в следующих публикациях:

1. Шульгин Д.А. Исследование перспективного полупроводникового соединения CuAlO_2 методом ядерного квадрупольного резонанса Cu / Матухин В.Л., Хабибуллин И.Х., Шульгин Д.А., Шмидт С.В., Теруков Е.И. // Физика и техника полупроводников. – 2012. – Т. 46. – Вып. 9. – С. 1126-1129. – ISSN 0015-3222.

2. Шульгин Д.А. Исследование полупроводникового соединения CuAlO_2 методом ЯКР $^{63,65}\text{Cu}$ / Матухин В.Л., Хабибуллин И.Х., Шульгин Д.А., Шмидт С.В. // Известия Высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т. 55. – №2. – С. 53-56. – ISSN 0021-3411.

3. Шульгин Д.А. Исследование перспективных термоэлектрических материалов методами ЯКР / Материалы докладов VI Международной молодежной научной конференции «Тинчуринские чтения» Т.1. - Казань: КГЭУ, 2011. – С. 269.

4. Шульгин Д.А. Ядерная релаксация в полупроводниковых соединениях со структурой делафоссита / Шульгин Д.А. // Материалы докладов 14 Всероссийской молодежной конференции по физике полупроводников и наноструктур, полупроводниковой опто - и наноэлектронике. - Санкт-Петербург: Издательство политехнического университета, 2012.- С. 10.

5. Шульгин Д.А. Исследование собственных дефектов в полупроводниковом соединении CuAlO_2 методом ЯКР / Шульгин Д.А., Шмидт С.В.// Материалы докладов VII Международной молодежной научной конференции «Тинчуринские чтения» Т.1. - Казань: КГЭУ, 2012. – С. 264.

6. Шульгин Д.А. Исследование дефектов в многокомпонентных полупроводниковых соединениях, используемых в фотоэлектрических преобразователях, методом ЯКР / Шульгин Д.А., Севастьянов М.Г., Шмидт С.В., Матухин В.Л., Корзун Б.В. // I Всероссийская научная конференция «Наноструктурированные материалы и преобразовательные устройства для солнечных элементов 3-го поколения»: Сборник материалов. Чебоксары, 2013. С. 82–83.

Список цитируемой литературы:

- [1] А.Ф. Иоффе. Энергетические основы термоэлектрических батарей из полупроводников. М.-Л.: АН СССР (1950).
- [2] А.В. Дмитриев, И.П. Звягин, УФН, 180, 821 (2010).
- [3] Л.И. Анатычук., Термоэлектричество. Термоэлектрические преобразователи энергии. – Киев, Черновцы: Институт термоэлектричества, 376 с. (2003).

- [4] J. Tate, H.L. Ju, J.C. Moon, A. Zakutayev, A.P. Richard, J. Russell, and D.H. McIntyre. Phys. Rev. B, **80**, 165206 (2009).
- [5] T.P. Das, E.L. Hahn, Solid State Supplement 1: Nuclear Quadrupole Resonance Spectroscopy. N.Y., Academic Press (1958).
- [6] Bruker. "Almanac 2005" (2005).
- [7] Р.С. Абдуллин, И.Н. Пеньков, Н.Б. Юнусов. Изв. АН СССР. Сер. Физ., т. 45. с. 1787 (1981).
- [8] G.S. Harbison, A.Z. Slokenbergs., Z. Naturforsch, V.45a, P. 575-580 (1990).
- [9] А.С. Ажеганов, И.В.Золотарев, А.С. Ким. Письма в ЖТФ, Т.25, С.74-77(1990).
- [10] T. Kushida, G.B. Benedek, N. Bloembergen. Phys. Rev. 1956, Vol.104, №5, P. 1364-1377(1956).
- [11] G.L. Baker and R.L. Armstrong. Amer. J. Phys., 36, 763 (1968).
- [12] Pellicer-Porres J., Martinez-Garcia D., Segura A., et al. // Joint 20th AIRAPT-43th ENPRG, June 27-July , Karlsruhe, Germany, 2005.

Подписано к печати
Гарнитура «Times»
Физ. печ. л. 1,0
Тираж 100 экз.

15.11.2013 г.
Вид печати РОМ
Усл. печ. л. 0,94
Заказ №

Формат 60x84/16
Бумага офсетная
Уч.-изд. л. 1.0