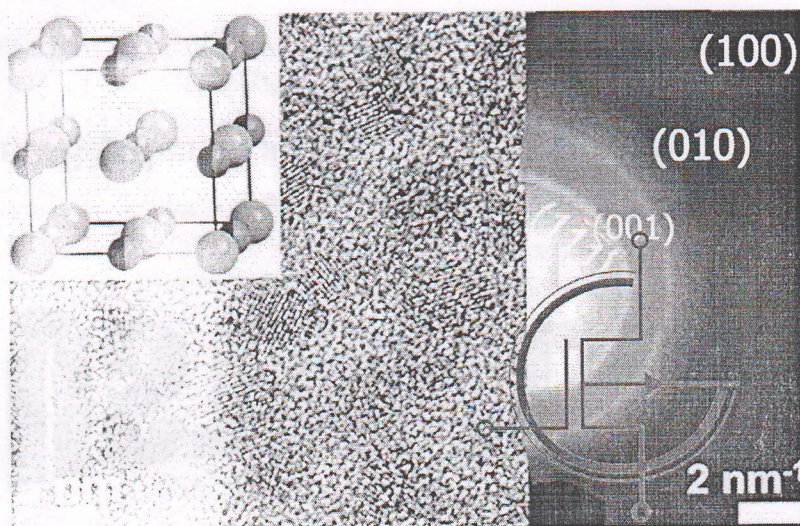


ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ
МИРЗО УЛУГБЕК НОМИДАГИ ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ
УНИВЕРСИТЕТИ
ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАР ФИЗИКАСИ ВА МИКРОЭЛЕКТРОНИКА
ИЛМИЙ-ТАДҚИҚОТ ИНСТИТУТИ
ФИЗИКА ФАКУЛЬТЕТИ

ЯРИМЎТКАЗГИЧЛАР ФИЗИКАСИНИНГ ҲОЗИРГИ ЗАМОН МУАММОЛАРИ

РЕСПУБЛИКА ИЛМИЙ АНЖУМАНИ МАТЕРИАЛЛАРИ

26-27 октябрь 2018 йил



МАТЕРИАЛЛАРИ РЕСПУБЛИКАНСКОЙ НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ

26-27 октября 2018 года

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

ТАШКЕНТ



ФУЛЛЕРЕНЫ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ТЕХНИКЕ

Самадов М.Х., Тайланов Н.А., Уринов Х.О., Джуманов Х. А.

*Национальный Университет Узбекистана
Джизакский Политехнический Институт,
Самаркандский Филиал Института Информационных Технологий*

Фуллерены - это большое семейство углеродных молекул, в которых атомы углерода располагаются в вершинах выпуклых многогранников, составленных из шестиугольных и пятиугольных граней. Пятиугольники необходимы для образования криволинейной поверхности, примером которой является сфера. Согласно теории многогранников, разработанной Л. Эйлером, число фуллеренов теоретически неограниченно. Простейший фуллерен состоит из 20 атомов углерода (C_{20}). Далее идут C_{24} , C_{26} ..., C_{60} , C_{70} и более крупные фуллерены до (C_{200} и выше). Самой устойчивой молекулой из семейства фуллеренов является бакминстерфуллерен, содержащий 60 атомов углерода [1].

Целью настоящего сообщения является теоретическое вычисление температуры сверхпроводящего перехода фуллерена C_{60} на основе системы уравнений Элиашберга.

Молекула C_{60} имеет форму - усечённого икосаэдра, в котором 12 пятиугольных граней и 20 шестиугольных [2]. В вершинах этого многогранника находятся атомы углерода (рис-1). Параметры сверхпроводящего состояния оказываются одинаковыми по всем кристаллографическим направлениям, что является следствием высокой симметрии кубической кристаллической решетки фуллерена [3].

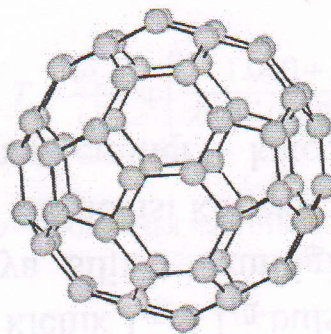


Рис-1. Молекула фуллерена C_{60}

Хорошо известно, что фуллерены щелочных металлов становятся сверхпроводящими при температуре определенного значения - температуры фазового сверхпроводящего перехода. Температура фазового перехода зависит от постоянной решетки фуллерена [3]. Максимальная температура перехода фуллеренов щелочных металлов немного выше 30 К, но для сложного состава она превышает 40 К. Теоретические вычисления, проведенные на основе решения системы уравнений Элиашберга показывают, что фуллерен C_{60} имеет значение T_c , равное 19.5 К.



Как мы знаем, что для оценки температуры сверхпроводящего перехода обычно используются уравнениями Элиашберга [4]. Стандартный метод расчета температуры сверхпроводящего перехода, как было отмечено в [4] это решение линеаризованных системы уравнений Элиашберга, которые можно представить в виде

$$\Delta(\omega) = \frac{1}{Z(\omega)} \int_{\Delta_0}^{\omega_c} d\nu \operatorname{Re} \left\{ \frac{\Delta(\nu)}{\sqrt{\nu^2 - \Delta^2}} \right\} [K^+(\omega, \nu) - \mu^*]$$

$$[1 - Z(\omega)]\omega = \int_{\Delta_0}^{\infty} d\nu \operatorname{Re} \left\{ \frac{\nu}{\sqrt{\nu^2 - \Delta^2}} \right\} K^-(\omega, \nu)$$

$$K^{\pm}(\omega, \nu) = \int_0^{\omega_0} d\omega_q \alpha^2 F(\omega_q) \left\{ \frac{1}{\omega_q + \nu + \omega + i\delta} \pm \frac{1}{\omega_q + \nu - \omega - i\delta} \right\}$$

$\Delta(\omega)$ частотно-зависящий параметр порядка, $Z(\omega)$ функция перенормировки, ν - нормировочный параметр, δ - дельта функция. Параметр порядка $\Delta(\omega)$ отличен от нуля только в сверхпроводящем состоянии, $Z(\omega)$ отлична от нуля в нормальном и сверхпроводящем состоянии и описывает перенормировку электронного спектра. Эта функция в нормальном состоянии имеет вид $Z(0) = 1 - \lambda$, где $\lambda = 2 \int_0^{\omega_0} d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega}$ -

константа электрон-фононной связи,

$\alpha^2 F(\omega)$ - спектральная плотность электрон-фононного взаимодействия. Фактически, эта функция определяет значение критической температуры сверхпроводника. Аналитическая аппроксимация решений системы уравнений Элиашберга дает искомое выражение для T_c [4]

$$T_c = \frac{\omega_{\ln}}{1.2} \exp \left[\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)} \right]$$

Здесь $\omega_{\ln} = \frac{2}{\lambda} \int_0^{\omega_0} d\omega \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} \ln \omega$ - фононная частота, $\mu^* = \frac{\mu}{1 + \mu \ln \left(\frac{\varepsilon_F}{\omega_{\ln}} \right)}$

кулоновский псевдопотенциал. Таким образом, задача вычисления температуры сверхпроводящего перехода T_c сводится к расчету величин λ , $\omega_{\ln}$ и μ^* . Для типичных значений параметров $\omega_{\ln} = 1003$ К, $\lambda = 1.2$ и $\mu^* = 0.25$ мы имеем для температуры сверхпроводящего перехода $T_c = 19.5$ К.

Открытие фуллеренов и их уникальное строение вызвали большой интерес у биологов и фармацевтов. Сегодня учёные большое внимание уделяют проблеме использования производных фуллерена в медицине и фармакологии. Обсуждается идея создания противораковых препаратов на основе «фаршированных» фуллеренов, внутри которых находятся радиоактивные изотопы [5]. Хорошо известно, что практически любое заболевание сопровождается избыточным образованием в организме свободных



радикалов. Их накопление порождают целую лавину отрицательных биологических процессов. Такое состояние называется оксидантным стрессом. Фуллерены способны с ним бороться. Например, гидроксированный фуллерен $C_{60}(OH)_{26}$, хорошо растворимый в воде, обладает значительно более высокой антиоксидантной активностью, чем витамины «Е» и «А». В отличие от этих одноразовых антиоксидантов (одна молекула витамина уничтожает только одну радикальную частицу), фуллерены являются многократными: они собирают на своей поверхности несколько радикалов, которые самоуничтожаются. Фуллерены эффективная ловушка для свободных радикалов.

Литература

1. Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C. et al. Nature. 1985. Vol. 318. P. 162.
2. А. В. Елецкий, Б. Н. Смирнов. Фуллерены и структуры углерода. 1995.
3. А. А. Лысенко, О. В. Асташкина, А. А. Петров. Фуллерен – аллотропная модификация углерода. 2006.
4. А. Я. Борщевский, И. Н. Иоффе, Л. Н. Сидоров, С. И. Троянов, М. А. Юровская. Фуллерены. 2007.
5. E. L. Wolf, "Principles of Electron Tunneling Spectroscopy", Oxford University Press London, 1985.

ОСОБЕННОСТИ СВОЙСТВ ПЕРОВСКИТОВ, ОБУСЛОВЛЕННЫЕ ОРГАНИЧЕСКИМИ ДИПОЛЬНЫМИ МОЛЕКУЛАМИ В УЗЛАХ РЕШЕТКИ

Оксенгендлер Б.Л.^{1,2}, Ашуров Н.Р.²,
Азимов Ж.Т.², Максимов С.Е.², Соколов В.Ю.²

¹Институт ионно-плазменных и лазерных технологий АН РУз, Ташкент

²Институт химии и физики полимеров АН РУз, Ташкент

В настоящее время очевидно, что многие свойства органико-неорганических перовскитов (в т.ч. смешанных) определяются большими органическими дипольными молекулами (типа CH_3NH_3), расположенными в узлах решетки [1] (Рис.1). Несмотря на важность этой проблемы, ее решение только начинается, но уже и сейчас можно выделить ряд направлений изучения.

1) Фактор толерантности (ФТ) Гольдшмидта (t). Кристаллохимия позволяет систематизировать устойчивость решетки по величине t , что всегда обсуждалось в рамках сферичных ионов. В случае же органико-неорганических перовскитов это заведомо не так, что обусловлено присутствием в узлах диполей. Здесь следует различать две ситуации с помощью отношения Q/kT , где Q – барьер вращения диполя, T – температура. Очевидно, что при очень быстрых поворотах $Q/kT \leq 1$ получаем $t \rightarrow t_{эфф}$, причем радиус эффективного иона будет равен половине плеча диполя, и здесь полностью справедлив подход Гольдшмидта. Если же $Q/kT \gg 1$, то решетка успевает релаксировать к стабильным положениям диполя, создает анизотропию деформации кристалла и ведет к ряду