

Чтобы объяснить уширение АСФЛ спектра с уменьшением энергии возбуждения так же, как и полученное значение ΔE_{UC}^{\max} , мы вынуждены предложить дисперсию плотности состояний на ловушечных энергетических уровнях, которая может объяснить, как и другие явления, многоэкспоненциальный спад ФЛ в наших НК CdTe [24]. Также линейная зависимость интенсивности АСФЛ от интенсивности возбуждения согласуется с предположением, что существуют относительно долгоживущие экситонные состояния, отвечающие за рост АСФЛ [11, 12].

При высоких температурах процесс перезахвата становится более значимым и дает рост интенсивности АСФЛ. Разумно ввести энергию активации E_{act} для процесса перезахвата. Эта энергия активации должна быть тем выше, чем глубже захвачен и более локализован электрон. Из анализа графиков Аррениуса мы оценили, что E_{act} должна быть в пределах 300-360 мэВ. Не смотря на то, что простая модель, предложенная в данной работе, хорошо описывает все результаты АСФЛ, полное описание антистоксового преобразования энергии фотонов в НК CdTe требует знаний природы появления и плотности локализованных состояний, а также соответствующего электрон-фононного взаимодействия, которые не до конца осмыслены до настоящего времени.

ВЫВОД

Обнаружена эффективная антистоксова фотолюминесценция в НК CdTe, приготовленных методом коллоидного синтеза. Показано, что эффективность АСФЛ и значение спектрального сдвига зависят от размеров нанокристаллов, температуры исследуемого образца и интенсивности возбуждения. Множество экспериментальных данных указывает на то, что внутрizonные поверхностные состояния вовлечены в процесс антистоксового преобразования энергии фотонов.

БЛАГОДАРНОСТЬ

Автор благодарит Н.П. Гапоника и А.Л. Рогача за предоставленные образцы.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. V.Yu. Ivanov, Yu.G. Semenov, M Surma and M. Godlewski, *Phys. Rev. B* **54**, 4696 (1996).
2. H.M. Cheong, B. Fluegel, M.C. Hanna and A. Mascarenhas, *Phys. Rev. B* **58**, 4254 (1998).
3. W. Heimbrod, M. Napp and F. Henneberger, *Phys. Rev. B* **60**, 16326 (1999).

УДК 681.3.068

Краглер Р., Русаков К.И., Русаков Е.К.

ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМЫ «МАТЕМАТИСА» ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПО ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА

При изучении курса «Физика твердого тела» система компьютерной алгебры «Mathematica» позволяет сделать более наглядными строение и симметрию кристаллической решетки для различных сингоний [1]. Кроме того, «Mathematica» позволяет быстро проводить вычисления различных параметров, характеризующих кристаллическую решетку. Данная работа показывает возможности «Mathematica» при решении некоторых распространенных задач по физике твердого тела.

При изучении основ кристаллографии часто встречаются за-

4. R. Hellmann, A. Euteneuer, S. G. Hense, J. Feldmann, P. Thomas, E. O. Göbel, D. R. Yakovlev, A. Waag and G. Landwehr, *Phys. Rev. B* **51**, 18 053 (1995).
5. P.P. Paskov, P.O. Holtz, B. Monemar, J.M. Garcia, W.V. Schoenfeld and P.M. Petroff, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 812 (2000).
6. I.V. Ignatiev, I.E. Kozin, H. Wen Ren, S. Sugou and Y. Masumoto, *Phys. Rev. B* **60**, 14001 (1999).
7. E. Poles, B.C. Selmarten, O.I. Micic, A.I. Nozik, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 971 (1999).
8. W. Heimbrod, H. Falk and P.J. Klar, *J. Lumin.* **87&89**, 344 (2000).
9. E. Beckmann, I. Broser and R. Broser, *Luminescence of Crystals, Molecules, and Solutions*. ed. F. Williams (Plenum Press, New York 1973) pp.155-161.
10. E.J. Johnson, J. Kafalas, R.W. Davies and W.A. Dyes, *Appl. Phys. Lett.* **40**, 993 (1982).
11. J. Diener, D. Kovalev, H. Heckler, G. Polisski, N. Kunzner, F. Koch, A.L. Efros and M. Rosen, *Optics Materials* **17**, 135 (2001).
12. Yu.P. Rakovich, S.A. Filonovich, M.J.M. Gomes, J.F. Donegan, D.V. Talapin, A.L. Rogach and A. Eychmüller, *Phys. Stat. Sol. B* **229**, 449 (2002).
13. N.O. Dantas, F. Qu and R.S.S.P.C. Morais, *J. Phys. Chem. B* **106**, 7453 (2002).
14. F.A.J.M. Driessen, H.M. Cheong, A. Mascarenhas, S.K. Deb, P.R. Hageman, G.J. Bauhuis and L.I. Giling, *Phys. Rev. B* **54**, 5263 (1996).
15. S.K. Lyo, *Phys. Rev. B* **62**, 13641 (2000).
16. A.L. Rogach, L. Katsikas, A. Kornowski, D. Su, A. Eychmüller and H. Weller, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.* **100**, 1772 (1996).
17. W. Hoheisel, V.L. Colvin, C.S. Johnson and A.P. Alivisatos, *J. Chem. Phys.* **101**, 8455 (1994).
18. M.G. Bawendi, P.J. Carrol, W. Wilson and L. Brus, *J. Chem. Phys.* **96**, 946 (1992).
19. M. Shim, C. Wang and P. Guyot-Sionnest, *J. Phys. Chem. B* **105**, 2369 (2001).
20. M. Nirmal, C.B. Murray and M.G. Bawendi, *Phys. Rev. B* **50**, 2293 (1994).
21. D.F. Underwood, T. Kippeny and S.J. Rosenthal, *J. Phys. Chem. B* **105**, 436 (2001).
22. A.L. Efros, M. Rosen, M. Kuno, M. Nirmal, D.J. Norris and M.G. Bawendi, *Phys. Rev. B* **54**, 4843 (1996).
23. V.I. Klimov and D.W. McBranch, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4028 (1998).
24. A.M. Kapitonov, A.P. Stupak, S.V. Gaponenko, E.P. Petrov, A.L. Rogach and A. Eychmüller, *J. Phys. Chem. B* **103**, 10109 (1999).

дачи, в которых требуется определить индексы Миллера некоторой плоскости. Рассмотрим в общем виде задачу нахождения индексов Миллера для плоскости в кубической примитивной решетке. Пусть заданы три точки с координатами $[[m_1n_1p_1]]$, $[[m_2n_2p_2]]$, $[[m_3n_3p_3]]$, принадлежащие некоторой плоскости. Известно, что индексы Миллера равны наименьшим целочисленным коэффициентам при переменных в уравнении плоскости. Поэтому решение задачи по определению индексов Милле-

Краглер Роберт, профессор, доктор физ.-мат. наук Фаххохиуле Равенсбурга-Вайнгартена. Германия, 88241, Вайнгартен.

Русаков Егор Константинович, студент 2-го курса физического факультета Белорусского государственного университета. Беларусь, БГУ, 220050, г. Минск, пр. Ф. Скорины, 4.

ра сводится к нахождению уравнения плоскости, проходящей через точки с заданными координатами.

Поскольку решетка кубическая примитивная, то ее кристаллографические оси будут совпадать с осями декартовой системы координат, в которой уравнение плоскости, проходящей через три точки с координатами $[[m_1n_1p_1]]$, $[[m_2n_2p_2]]$, $[[m_3n_3p_3]]$, дается определителем третьего порядка

$$\begin{vmatrix} x - m_1 & y - n_1 & z - p_1 \\ m_2 - m_1 & n_2 - n_1 & p_2 - p_1 \\ m_3 - m_1 & n_3 - n_1 & p_3 - p_1 \end{vmatrix} = 0.$$

После ввода этой матрицы «Mathematica» с помощью функции **Det** вычисляет определитель, в котором коэффициенты при x, y, z являются индексами Миллера.

Отображение на экране компьютера узлов кристаллической решетки или различных плоскостей с помощью «Mathematica» можно провести достаточно быстро. Для построения линий и объемных фигур в пространстве можно использовать функцию **Graphics3D** и ее опции.

Например, зададим в прямоугольной системе координат вектор с началом в точке $(0,0,0)$ и концом в точке A с координатами $(2, 0, 0)$: **ptA={2,0,0}**;

Создадим графический объект – точку, соответствующую концу вектора: **A=Point[ptA]**.

Чтобы вывести графический объект A на экран, можно применить функцию **Show: Show[Graphics3D[A]**, в результате на экране появится изображение точки A внутри ограничительного «ящика». Для того, чтобы увидеть оцифровку осей, необходимо задать опцию **Axes->True**. Для наглядности можно указать метки координатных осей, добавив еще одну опцию **AxesLabel->{"x", "y", "z"}**.

Таким образом, после выполнения команды **Show[Graphics3D[A], Axes->True, AxesLabel->{"x", "y", "z"}** «Mathematica» выведет на экран оцифровку и метки координатных осей x, y, z . При таком способе вывода изображения на экран точка A находится по центру ограничительного «ящика», что не очень удобно для ряда задач, поскольку начало координат может отсутствовать в видимой области.

Рассмотрим метод, позволяющий задавать координатные оси x, y, z с помощью ортогональных линий, произвольно задаваемых пользователем. Для отображения прямоугольной системы координат в пространстве зададим длины линий, а также величину пробела между концом линии и обозначением оси, после чего можно создать графический объект из трех взаимно перпендикулярных осей.

```
h=5;
spacer=h/10;
threedims=Graphics3D[{
  {Line[{{-h,0,0},{h,0,0}}]},
  Text["x",{h + spacer,0,0]},
  {Line[{{0,-h,0},{0,h,0}}]},
  Text["y",{0, h+spacer,0]},
  {Line[{{0,0,-h},{0,0,h}}]},
  Text["z",{0,0,h + spacer]}],
  Boxed->False,Axes->False,
  ViewPoint->{1.75,1.224,1.7}
  ,AspectRatio->Automatic];
```

Используя готовый набор координатных осей **threedims**, в качестве примера отобразим две точки: $(2, 3, 1)$ и $(3, -2, -1)$.

```
pts =
Graphics3D[{{PointSize[0.05],Point[{2,3,1}]},{PointSize[0.02],
Point[{3,-2,-1}]}}];
Show[threedims,pts];
```

На рис.1 видно, что первая точка имеет на экране больший размер.

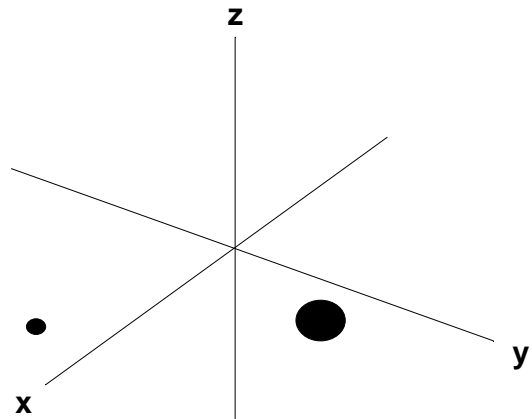


Рис.1. Набор координатных осей, выведенных на экран процедурой **threedims**, и точки с координатами $(2,3,1)$ и $(3,-2,-1)$.

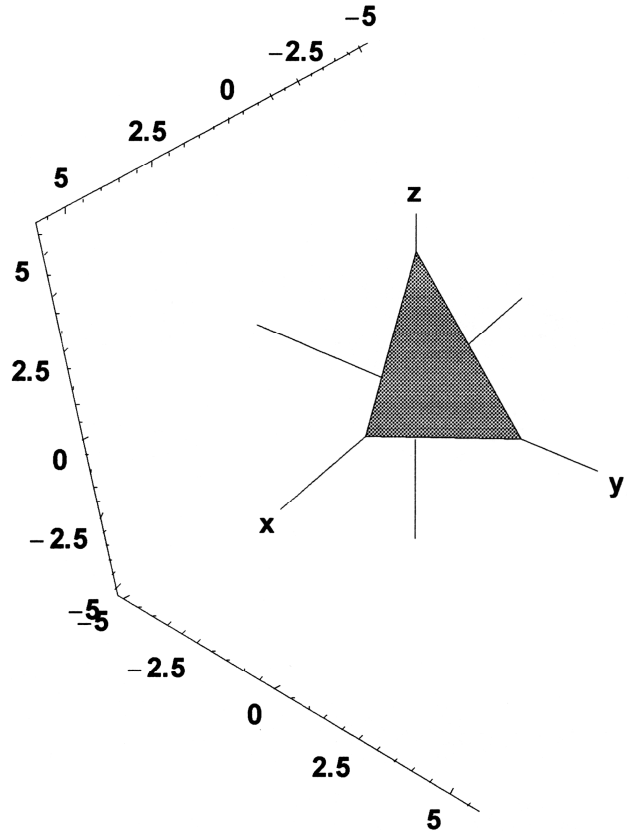


Рис.2. Вид плоскости, построенной функцией **Polygon**, относительно набора осей **threedims** и осей «ограничительного ящика».

Отображение плоскостей в трехмерной графике удобно производить с помощью функции **Polygon**, которая строит закрашенный многоугольник по координатам точек. Для примера выведем на экран плоскость по трем точкам вместе с набором осей **threedims**, а также оцифрованные оси от ограничительного «ящика» без его самого (рис.2):

```
planeplot =
Graphics3D[Polygon[{{2,0,0},{0,3,0},{0,0,4}}],DisplayFunction
->Identity];
Show[threedims, planeplot, DisplayFunction
->$DisplayFunction, Boxed->False, Axes->True];
```

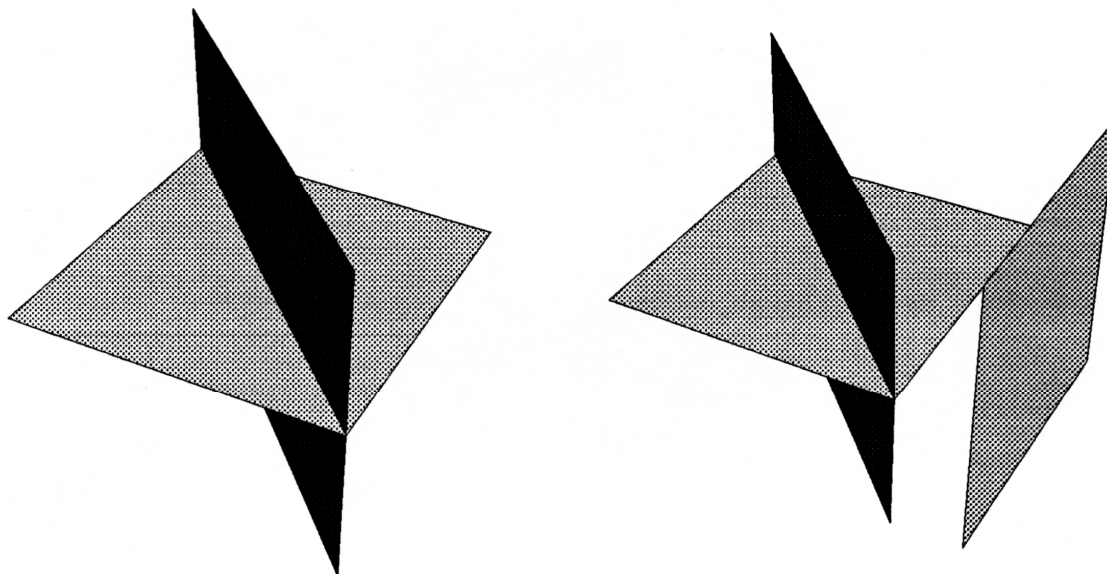


Рис. 3. Картина пересечения двух плоскостей (слева) и трех плоскостей (справа). Каждая плоскость задана координатами четырех точек.

Из рис.2 хорошо видно, как расположена плоскость относительно начала координат, и как идут оси в пространстве. Кроме того, теперь можно легко получить на экране картину пересечения плоскостей. Для начала зададим 3 плоскости:

```
plane1=Graphics3D[Polygon[{{-2,2,2},{-2,2,-2},{2,-2,-2},{2,-2,2}}]];
plane2=Graphics3D[Polygon[{{2,2,0},{2,-2,0},{-2,-2,0},{-2,2,0}}]];
plane3=Graphics3D[Polygon[{{3,2,2},{3,2,-2},{3,-2,-2},{3,-2,2}}]];

```

Выведем объекты на дисплей (рис.3):

```
Do[Show[GraphicsArray[
  Show[plane1, plane2, Boxed->False, Axes->False,
  DisplayFunction->Identity],
  Show[plane1, plane2, plane3, Boxed->False, Axes-
  >False, DisplayFunction->Identity]], DisplayFunction-
  > $DisplayFunction];]

```

На рис.3 слева выведено пересечение первой и второй плоскости, а справа – это же пересечение и третья плоскость. Из сравнения рис.2 и рис.3 видно, что задание плоскости четырьмя точками помогает более правильно представить ее положение в пространстве. Если требуется визуально получить пересечение плоскостей, заданных тремя точками, на экране выводится не очень наглядное пересечение двух треугольников. Следовательно, для получения более наглядного графика нужно найти еще одну точку, принадлежащую данной плоскости, необходимо использовать необходимое и достаточное условие компланарности четырех точек:

$$\begin{vmatrix} x_1 - x_0 & y_1 - y_0 & z_1 - z_0 \\ x_2 - x_0 & y_2 - y_0 & z_2 - z_0 \\ x_3 - x_0 & y_3 - y_0 & z_3 - z_0 \end{vmatrix} = 0,$$

где (x_0, y_0, z_0) – координаты четвертой искомой точки. Одну из координат искомой точки следует при этом задать самостоятельно, а две других оказываются связанными между собой в выражении определителя матрицы, что позволяет получить требуемый результат.

В приведенных выше примерах в основном использовались графические возможности «Mathematica», однако она позволяет успешно решать и вычислительные задачи в символьном виде. Рассмотрим задачу о колебаниях кристаллической решетки на примере нормальных колебаний линейной двухатомной цепочки. Попробуем решить дисперсионное уравнение для линейной цепочки с периодом a , состоящей из двух сортов атомов массами m_1 и m_2 соответственно, сило-

вая постоянная которой равна f . В предположении, что смещения соседних атомов не выходят за пределы упругой области, колебания будут описываться уравнениями, которые удовлетворяют соотношению [2, 3]

$$\begin{vmatrix} \frac{2f}{m_1} - \omega^2 & \frac{f}{\sqrt{m_1 m_2}} (1 + e^{-ika}) \\ \frac{f}{\sqrt{m_1 m_2}} (1 + e^{ika}) & \frac{2f}{m_1} - \omega^2 \end{vmatrix} = 0.$$

Данный определитель легко вычисляется в символьном виде

$$\omega^4 - \frac{2f\omega^2}{m_1} - \frac{2f\omega^2}{m_2} + \frac{2f^2}{m_1 m_2} - \frac{2f\omega^2 \cos(ak)}{m_1 m_2} = 0.$$

Полученное уравнение распадается на 2 других:

$$\omega_-^2(k) = \frac{f(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} - \frac{f\sqrt{m_1^2 + 2 \cos(ak) m_1 m_2 + m_2^2}}{m_1 m_2},$$

$$\omega_+^2(k) = \frac{f(m_1 + m_2)}{m_1 m_2} + \frac{f\sqrt{m_1^2 + 2 \cos(ak) m_1 m_2 + m_2^2}}{m_1 m_2}.$$

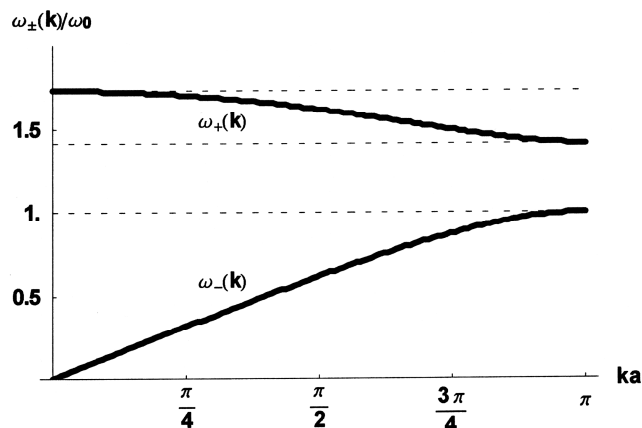


Рис. 4. Дисперсионные кривые для линейной цепочки атомов (масса атома первого типа в два раза больше массы атомов второго типа).

Следовательно, каждому волновому вектору соответствуют два решения для частоты. Построим график дисперсионных кривых, приведенных к максимальной циклической частоте при массе первого атома в два раза больше второго (рис.4):

```
Plot[{{ω+[k]/ω0 ->1., a ->1}, {ω-[k]/ω0 ->1., a ->1}, 1., √2, √3}, {k, 0., π},
PlotPoints ->120, AspectRatio ->0.6, PlotRange ->{0,2}
PlotStyle ->{{Thickness[0.01]}, {Thickness[0.01]}, ds, ds, ds},
Ticks->{UnitScale[0,π, π/4], UnitScale[0, 1.8, .5]},
Prolog->{Text["ω-[k]", {1,0.6}], Text["ω+[k]", {1,1.55}],
Text["√2", {3.4,1.4}],
Text["√3", {3.4,1.72}], PlotLabel->"", AxesLabel
->{"ka", "ω±/ω0"};
```

На рис.4 хорошо видны акустическая и оптическая ветви спектра колебаний цепочки атомов, что позволяет увидеть

УДК 531

Чопчиц Н.И.

ГРАВИТАЦИОННОЕ СЖАТИЕ В НЬЮТОНОВСКОЙ ТЕОРИИ И ИНВЕРСИЯ ВРЕМЕНИ

Широко распространено мнение, что гравитационное сжатие однородного пылевого облака можно рассматривать как обращенный во времени процесс расширения Вселенной с постоянной Хаббла не зависящей от координат [1]. Для последнего случая в ньютоновской теории имеем для скорости $\bar{v} = H\bar{r}$, где H – постоянная Хаббла, \bar{r} – радиус-вектор точки наблюдения относительно произвольной частицы. Закон изменения расстояния между частицами имеет вид

$$r_{AB}(t) = r_{AB}(t_0) \exp \int_{t_0}^t H(t) dt,$$

а закон изменения плотности, который вытекает из уравнения неразрывности $\frac{\partial \rho}{\partial t} + \bar{\nabla}(\rho \bar{v}) = 0$ в предположении $\rho = \rho(t)$

даст $\frac{\partial \rho}{\partial t} = -3H\rho$, т.е. $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ не зависит от координат. Следовательно, если плотность ρ в какой-то момент не зависела от координат, то она не будет зависеть от координат и в последующие моменты времени, хотя и является функцией времени. При гравитационном сжатии на каждую частичку, находящуюся на расстоянии r от центра облака, действует, по мнению сторонников вышеупомянутой точки зрения, сила

$$F = G \frac{mM'}{r^2} = G \frac{m}{r^2} M \frac{r^3}{R^3} = \frac{GM}{R^3} mr,$$

где $M' = M \frac{r^3}{R^3}$ – масса части пылевого облака радиусом R и массой M , находящаяся внутри сферы радиуса r , m – масса рассматриваемой частицы. Следовательно, для ускорения имеем

$$a_r = -\frac{GM}{R^3} r.$$

Вводя безразмерную переменную $\xi(t) = \frac{r(t)}{r_0}$ равную от-

качественную разницу между колебательными модами кристаллической решетки.

Таким образом, в данной работе продемонстрированы примеры использования компьютерной алгебры «Mathematica» для решения задач по основам кристаллографии, которые подтверждают ее большие возможности, как в повышении наглядности решений, так и проведении символических вычислений по различным разделам физики твердого тела.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Краглер Р., Русаков К.И., Тарасюк Н.П. Визуализация кристаллических решеток в пакете «МАТЕМАТИКА»// Вестник Брестского государственного университета. - 2002. - № 5. - С. 151-160.
2. W. Ludwig *Festkorperphysik I*, Akadem. Verlagsgesellschaft (1970), Chapt. 4.1.3, p. 138
3. J.M. Ziman *Principles of the Theory of Solids*, Cambridge Univ. Press (1969), Chapt. 2.2, p.33.

ношению расстояния от частицы до центра в произвольный момент времени к ее начальному расстоянию, будем иметь для скорости и ускорения $\bar{v} = \dot{r} = r_0 \dot{\xi}$, $a_r = r_0 \ddot{\xi}$, так что имеем

$$a_r = -\frac{GM}{R^3} \xi.$$

Поскольку в последнем выражении отсутствует начальное расстояние, утверждается, что в силу $\xi_0=1$ значение ξ для всех частиц облака сохраняется одинаковым и, следовательно, однородность облака, имеющая место при $t=0$, сохраняется и в последующие моменты времени. Покажем, что это не так. Предположим вначале, что частицы пылевого облака в процессе сжатия не обгоняют друг друга (это будет доказано в дальнейшем). Для частички, начальное расстояние от которой до центра равно r_0 , масса притягивающего ее шара равна

$$M' = \frac{4}{3} \pi r_0^3 \rho_0$$

и с течением времени не изменяется, поэтому

$$\ddot{r} = -\frac{GM'}{r^2}.$$

Поскольку $\ddot{r} = v_r \frac{dv_r}{dr}$, то, интегрируя с учетом начального условия: при $r=r_0$, $v_{r0}=0$, получим

$$v_r = -\sqrt{2GM' \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_0} \right)}.$$

Интегрируя еще раз, имеем

$$t = \sqrt{\frac{3}{8G\rho_0}} \left(\frac{\sqrt{r(r_0-r)}}{r_0} + \arctg \sqrt{\frac{r_0}{r} - 1} \right). \quad (1)$$

В силу монотонности функции $t(r)$ для того, чтобы показать, что частицы при сжатии действительно не обгоняют

Чопчиц Николай Игнатьевич, профессор каф. физики Брестского государственного технического университета. Беларусь, БГТУ, 224017, г. Брест, ул. Московская, 267.