

Налепа А.О., Стицай В.Р.

студенти,

Волинський національний університет

імені Лесі Українки

ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ АМОРФНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ

Швидкий розвиток радіотехніки спричинений створеннями перших електровакуумних приладів. Ці прилади стали невід'ємною частиною радіоприладів, характеризували технічні показники даної апаратури. У сучасному світі високих швидкостей передачі інформації, розвитку радіомовлення, телебачення вакуумні прилади замінили конкурентоспроможними напівпровідниковими. Напівпровідники за короткий час набули великого застосування в радіотехнічній апаратурі, тому що мають важливі якості: великий термін використання, малі габарити, високу механічну міцність, незначне споживання енергії.

Напівпровідникові прилади широко використовуються для керування передачею енергії в електронних системах. За останні двадцять років технологія досягла вражаючого прогресу. Цікаво переглянути історію створення напівпровідників. Важливий поштовх зробив винахід у 1874 році – створений випрямляч (перетворювач змінного струму). У США в лабораторії Белл Бардін і Браттейн винайшли точково-контактний транзистор (1947р.). Саме з цього моменту розпочалася ера транзисторів і у 1956р. Нобілевську премію з фізики отримали спільно Шоклі, Бардін та Браттейн за дослідження напівпровідників та розробку транзисторів. У 1959 році винахід – біполярна інтегральна схема (ІС), зробив переворот у створенні електричних приладів, які в сучасному світі використовуються в різних галузях нашого повсякденного життя [1]. Велику цікавість викликають матеріали з новими фізико-хімічними властивостями, матеріали, які в майбутньому займуть чільне місце в промисловості, медицині та інших галузях життя.

У даній роботі розглянуто властивості аморфних тіл, зокрема, напівпровідників.

Електричні властивості напівпровідників характеризуються:

- температурою: при низьких температурах напівпровідники не проводять струму, при збільшенні температури – струм по напівпровіднику проходить;
- освітленням: опір при освітленні зменшується;
- наявністю домішок: зміна властивостей при наявності малих концентрацій домішок;
- ефектом випрямлення струму (неоммічна поведінка на контактах);
- температурним коефіцієнтом, який має додатне значення $\frac{d\sigma}{dT} > 0$ відмінно від металів.

В залежності від чистоти, напівпровідники відповідно до носіїв заряду, поділяються на власні та домішкові. Напівпровідники, що складаються з одного елемента називаються елементарними напівпровідниками, прикладом може слугувати напівпровідниковий матеріал – кремній. Напівпровідники, що складаються з двох або більше сполук, називаються складеними напівпровідниками і використовуються в напівпровідникових лазерах, світлодіодах тощо.

Тобто, напівпровідники займають проміжне місце між металами та діелектриками відповідно до їх електричної провідності. Важливо зауважити, що напівпровідники, на відміну від металів, складаються з атомів, які зв'язані між собою ковалентним зв'язком (Ge, Si і т. д.), тобто вони мають атомну кристалічну ґратку. Напівпровідники можна поділити на органічні та неорганічні напівпровідникові сполуки, які є кристалами з йонною та молекулярною ґраткою (лужні оксиди металів, галогеніди тощо).

Напівпровідники поділяють на кристалічні та некристалічні у свою чергу некристалічні напівпровідники поділяють на аморфні (α -Si, α -Ge, Se, Sb, Te), рідкі (розтоплені Se, Te, розплави оксидів, сульфідів селенідів і телуридів деяких металів) та склоподібні. Найпоширенішими серед склоподібних є халькогени (стопи P, As, Sb, Bi, з S, Se, Te, наприклад, As₂Se₃, As₂S₃, As₂Te₃) та оксидні (V₂O₅ – P₂O₅ – MeOx).[4] Важливо відмітити, що головною рисою всіх некристалічних напівпровідників є відсутність дальнього порядку у розташуванні атомів, що є причиною низької рухливості носіїв заряду та суттєвих змін в енергетичному спектрі. Аналізуючи результати дифракції рентгенівських променів, спектрів поглинання в напівпровідниках, можна стверджувати, що всі властивості напівпровідників зумовлені ближнім порядком розташування атомів. Саме таке розташування атомів

є однією із важливих характеристик аморфного стану тіл – ізотропія, наявність поверхонь довільної форми на зломі та відсутність точки плавлення. Прикладами аморфних тіл можуть бути скло, смола, каніфоль, різні пластмаси, полімери – органічні аморфні тіла (целюлоза, каучук та ін.).

Необхідно виділити деякі основні властивості аморфних тіл.

– Відсутність кристалічної ґратки, лише ближній порядок розташування молекул (див. рис. 1 а, б).

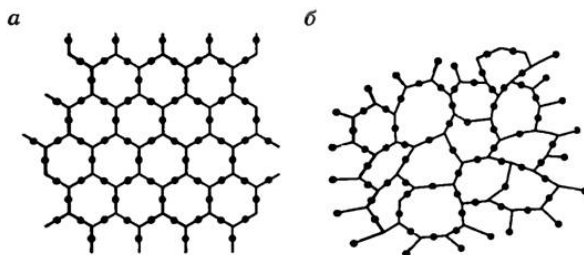


Рис. 1. Схема розташування молекул кварца: (а) – кварцового скла; (б) – аморфного тіла

– Аморфні тіла володіють слабкою текучістю. Ця властивість пояснюється перестрибуваннями молекул з одного положення і інше.

– Аморфні тіла не мають визначеної температури плавлення. Аморфні тіла при нагріванні переходять в рідкий стан (див. рис. 2, крива 2).

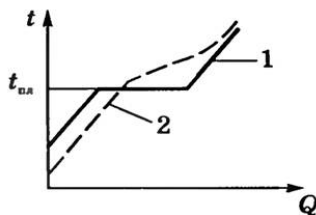


Рис. 2. Залежність температури від кількості теплоти

– Фізичні властивості аморфних тіл у всіх напрямках однакові, тобто властива ізотропія.

– Внутрішня енергія речовин в аморфному стані набагато більша, ніж в кристалічному, тому аморфні тіла можуть переходити в кристалічний стан, наприклад, потемніння з часом скла.

Аморфні напівпровідники мають ряд переваг для використання їх в промисловості та побуті. Розподіл енергії електронних станів в аморфному матеріалі має подібний розподіл, який показує спорідненість даного матеріалу в кристалічній формі.

У напівпровідниках властивості зарядів (електронів, дірок) не можна описати, що це є «газ вільних електронів». Всі зміни, що спостерігаються з електронами під впливом зовнішніх факторів, наприклад, оптичного випромінювання, характеризує перехід електронів між різними квантовими енергетичними рівнями [5].

Під дією кванта світла у напівпровідниках виникають кулонівські сили взаємодії між електронами та дірками. Виникає зв'язаний стан між електроном та діркою, який називається екситон. Тому міжзонні процеси поглинання за температури, при якій виявляються квантові властивості повинні мати екситонний характер. Поглинання світла, спричинене утворенням екситонів, спостерігається за менших енергій, ніж між зонне поглинання, так як енергія зв'язку екситону набагато менша за енергію забороненої зони (E_g). Відповідно на шкалі енергій екситон не поглинання розташоване ближче до власного поглинання світла напівпровідником, але відрізняється від нього більш низькою частотою початку поглинання.

Оптичні властивості напівпровідників мають великі перспективи для впровадження у медицині як оптичних сенсорів, флуоресцентних маркерів, фотосенсибілізаторів. Широке застосування має в оптоелектроніці, зокрема, для виготовлення фотодетекторів, які працюють в інфрачервоному діапазоні частот, сонячних батарей, надмініатюрних світло діодів, випромінювачів світла та нелінійно-оптичних пристроїв.

Список використаних джерел:

1. History of semiconductors [Електронний ресурс]. – Електронні текстові та зображувальні дані. – Режим доступу: <https://www.hitachi-hightech.com/global/products/device/semiconductor/history.html> (дата звернення: 12.02.2021). – Назва з екрана.

2. Класична теорія електропровідності металів та виведення із неї законів Ома та Джоуля – Ленца [Електронний ресурс]. – Електронні текстові та зображувальні дані. – Режим доступу: <https://fizmat.7mile.net/> (дата звернення: 12.02.2021). – Назва з екрана.

3. Band Theory of Electrical Conductivity History of semiconductors [Електронний ресурс]. – Електронні текстові та зображувальні дані. – Режим доступу: <https://courses.lumenlearning.com/boundless-chemistry/chapter/band-theory-of-electrical-conductivity/> (дата звернення: 20.02.2021). – Назва з екрана.

4. Сучасні напівпровідникові матеріали [Електронний ресурс]. – Електронні текстові та зображувальні дані. – Режим доступу: <https://kc.pnu.edu.ua/wp-content/uploads/sites/11/2018/04> (дата звернення: 10.02.2021). – Назва з екрана.

5. Нанофізика, наноматеріали, наноелектроніка [Електронний ресурс]. – Електронні текстові та зображувальні дані. – Режим доступу: https://me.kpi.ua/downloads/Poplavko_Nanophysics_2012.pdf (дата звернення: 15.02.2021). – Назва з екрана.

Стов Є.А.

*кандидат фізико-математичних наук, доцент,
Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара*

РОЗРАХУНКИ СПЕКТРІВ ПОГЛИНАННЯ ФОТОРЕАКТИВНИХ СПОЛУК: ЕЛЕКТРОСТАТИЧНА ВЗАЄМОДІЯ ІЗ СЕРЕДОВИЩЕМ

Деякі органічні сполуки при поглинанні світла виявляють перенесення протона від однієї частини молекули до іншої. Такі сполуки є фотореактивними, а реакція має назву внутрішньомолекулярне фотоперенесення протона [1]. Одним з напрямів досліджень таких сполук є моделювання їхніх властивостей за допомогою квантовомеханічних методів. Практичне використання фотореактивних речовин передбачає оточення молекул рідким або твердим розчинником, тому в моделюванні є необхідним врахування взаємодії сполуки із середовищем.

В даній роботі розглянуто вплив взаємодії з неполярним розчинником молекули сполуки 2-(2'-гідроксифеніл)бензоксазол (НВО) (рис. 1) на величину енергії та сили осцилятора вертикальних переходів (переходи, що протікають без зміни положень ядер атомів). Розрахунки були проведені з використанням програмного пакету ORCA [2; 3], функціоналу B3LYP [4], базисних наборів функцій def2-SVP, def2-TZVP, та базисного набору def2-TZVPD, який містить дифузні функції [5].