

Національна Академія наук України
Інститут фізики
Інститут металофізики ім. Г.В.Курдюмова
Інститут проблем реєстрації інформації
Ужгородська лабораторія матеріалів оптоелектроніки
та фотоніки Інституту проблем реєстрації інформації
Ужгородський національний університет

Школа-конференція молодих вчених

СУЧАСНЕ МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО: ФІЗИКА, ХІМІЯ, ТЕХНОЛОГІЇ
(СМФХТ – 2019)

Ужгород Водограй Україна, 27 - 31
травня 2019 р.

ПРОГРАМА ТА
МАТЕРІАЛИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Ужгород
2019

Діаграми стану систем на основі оксидів рідкісноземельних елементів як основа створення нових матеріалів Чудінович О. В.	235
Закономірності впливу холодного ізостатичного пресування на властивості твердого сплаву ВК8 Шеремет В.І., Акімов Г.Я., Андреев І.В., Романенко Ю.М., Соловйова Т.О.	237
Температурні і частотні залежності діелектричних властивостей стекол в системах Ag-As-S(Se) Шпак О.І.	240
Термооптические свойства стеклообразных сплавов системы As-S Шпак И.И.	242
Розрахунок профілів розподілу електронних станів в області краю власного поглинання стекол Ag-As-Se Шпак О.І.	244
Швидкісний метод формування масивів наночастинок металів Асішко Т.І., Чиж Р.В., Поп М.М., Пісак Р.П., Онопко В.В., Кириленко В.К.	246
Кінетика фазових перетворень в аморфних плівках системи As ₂ S ₃ -SbSI Асішко Т.І., Чичура І.І., Тарнай А.А., Онопко В.В., Мотрунич В.В., Суусенок О.В.	249

их учены

ВО:
ІE:
LOGYДЕНИЕ:
ИИ

Розрахунок профілів розподілу електронних станів в області краю власного поглинання стекол Ag-As-Se

Шпак О.І.

Ужгородський національний університет, Україна,
88000, Ужгород, вул. Піаццра, 46

Для реальної картини розподілу густини станів (ГС) в околі критичних енергій E_c і E_v необхідно враховувати як результати теоретичних розрахунків електронних станів в області хвостів при різних типах розупорядкування, так і експериментальні дані по оптичному поглинанню в області краю.

Будемо виходити із загальних виразів для густини стану в області країв V-і C-зон [1]:

$$g(E) \sim (E_v - E)^{\gamma-1} \text{ при } E < E_v \quad (1a)$$

$$g(E) \sim (E - E_c)^{\gamma-1} \text{ при } E > E_c \quad (16)$$

де γ_v і γ_c визначені топологічними інваріантами центрів смуг в C- і V-зонах. В області краю для аналізу розподілу ГС для стекел в літературі розглядаються наступні вирази:

$$\rho(E) \sim e^{\beta E} \quad (2)$$

$$\rho(E) \sim e^{\beta E^2}, \text{ при } E_v \leq E \leq E_c.$$

Ці вихідні вирази для розподілу ГС характерні практично для всіх теоретичних робіт, присвячених розрахункам густини станів в області краю і дослідження впливу різних типів безладу на енергетичний спектр невпорядкованих матеріалів [1, 2].

Для розрахунку коефіцієнта поглинання в області краю $\alpha(h\nu)$ виберемо наступні моделі густини станів [1]:

$$\rho_v(E) = \theta(E - E_c) \bar{\rho}_v e^{\beta_v(E - E_c)} + \theta[E - E_c] a_v \sqrt{E - E_c + \left(\frac{\rho_c}{a_c}\right)^2} \quad (3a)$$

$$\rho_c(E - h\nu) = \theta(E - h\nu - E_v) \bar{\rho}_c e^{\beta_c(E - E_v)} + \theta[E_v - E + h\nu] a_c \sqrt{E_v - E + h\nu + \left(\frac{\rho_v}{a_v}\right)^2} \quad (36)$$

де $\theta(\epsilon \leq 0) = 0$, $\theta(\epsilon > 0) = 1$ та $\theta[\epsilon \leq 0] = 0$, $\theta[\epsilon \geq 0] = 1$ - функція Хевісайда.

Будемо виходити із загального виразу для $\alpha(h\nu)$:

$$h\nu \cdot \alpha(h\nu) = \sum_{ij} A_{ij} \int \rho_i(E) \rho_j(E - h\nu) dE \quad (4)$$

де $ij = N_v, N_c, L_v, L_c$. Повний аналітичний розрахунок всіх складових $\alpha(h\nu) = \alpha_{L_v} + \alpha_{N_v} + \alpha_{N_c} + \alpha_{L_v}$ приведено в наближенні $\beta_c = \beta_v$ та $\frac{\rho_c}{a_c} = \frac{\rho_v}{a_v}$ для

моделей ГС (3a) і (36). Розв'язання відповідного інтегрального виразу визначалось на класі параметрично заданих функцій (з, а-б). Параметри моделі знаходились із умови мінімуму функціоналу

по шуканим параметрам, де $P(\epsilon)$ - вагова функція. Шляхом варіювання двох параметрів β_c і β_v добивались узгодження форми і спектральної поведінки $\alpha(h\nu)$ для певного складу з експериментальною кривою поглинання. Отримані в результаті зв'язку інтегрального рівняння (5) параметри використовувались для розрахунку інтегральної N_s густини стану в хвості валентної зони і зони провідності (рис.1.)

$$N_s^{exp} = \int \rho(E) dE \quad (6)$$

Із розрахунків і моделювання краю поглинання сплавів $(Ag_2Se)_x(Ag_2Se)_{100-x}$ випливають два важливі висновки: а) для всіх складів $x \geq 0.10$ хвіст зони провідності спадає різкіше хвоста валентної зони, тобто $\beta_c > \beta_v$; б) збільшення вмісту Ag_2Se приводить до уширення, як хвоста валентної зони, так і зони провідності, але починаючи із складу $x \geq 5 \rightarrow \beta_c \gg \beta_v$. Це означає, що оптичний хвіст, зареєстрований на експерименті, являє собою хвіст розподілу густини станів валентної зони. Специфічна поведінка N_c для складів $x = 5, 10$ (згини), показує, що поява «плеча» оптичного хвоста при цих складах не є власним, а пов'язана з дефектами структурної сітки стекел.

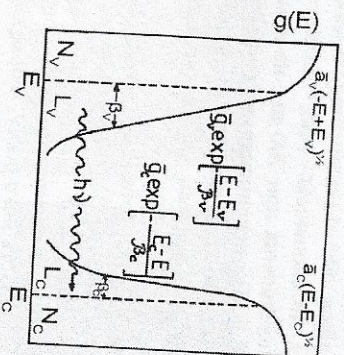


Рис.1. Схематичний розподіл станів з експоненціальними хвостами ГС_v і ГС_c. До розрахунку $\alpha(h\nu)$ по формулі (4).

Проведені розрахунки, сучасні експериментальні результати по оптичному поглинанню показують, що розглянута модель якість якою пояснює зміни форми краю при варіації складу сплавів системи Ag-As-Se. Хоча форма краю і ускладнена електрон-фононною взаємодією, зміна нахилу, ймовірно, відображає зміни розподілу станів в хвості.

1. Бонч-Бруевич В.Л. Вопросы электронной теории неупорядоченных полупроводников / В.Л. Бонч-Бруевич // УФН. -1983. -Т.140, в.4. -С.583-616.
2. Ступеняк І.П., Краньчел М., Курик М.В. Оптика розупорядкованих середовищ. Ужгород: Говерла, 2008. - 224 с.