

Наукова рада з проблеми “Фізика напівпровідників та напівпровідникові пристрої”
при відділенні фізики й астрономії Національної академії наук України
Національна академія наук України
Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України
Інститут електронної фізики НАН України
Інститут проблем реєстрації інформації НАН України
Ужгородський науково-технологічний центр МОНІ ПІРІ НАН України
Міністерство освіти і науки України
Ужгородський національний університет
Українське фізичне товариство
Академія наук вищої школи України

**Збірник тез
V Української
наукової конференції
з фізики напівпровідників**

УНКФН-5

Ужгород, 9–15 жовтня 2011 р.

Конференція проводиться в рамках відзначення UNESCO року
Марії Кюрі-Склодовської

Ужгород
2011

частинками, то постає важлива задача вияснення їх власної будови з визначенням параметрів хімічної взаємодії між атомами. А це неможливо виконати без застосування сучасних квантово-механічних розрахунків.

2. Сучасні теоретичні та експериментальні дослідження показують, що об'єм речовини можна розглядати як континуум, в якому починають проявлятися властивості масивних зразків, якщо він містить більше 400 – 500 атомів. Це відповідає розмірам сконденсованих острівків плівок порядку 5 – 10 нм. Тому і розміри генерованих моделей атомної сітки аморфних напівпровідників мають бути такої ж величини. Математична ж обробка таких великих моделей є досить складною задачею.

3. Для моделювання фізично реальної релаксації генерованої моделі у свій рівноважний структурний стан слід застосовувати багаточастинкові потенціали міжатомної взаємодії. Для ковалентних же атомних сіток напівпровідників такі надійні потенціали на сьогодні відсутні.

4. Отримувані кінцеві комп'ютерні моделі мають відповідати фундаментальним фізико-хімічним принципам будови конденсованих середовищ та узгоджуватися з усіма наявними експериментальними даними. При цьому розміри зразків для таких експериментів мають відповідати розмірам створеної моделі. Це ж вимагає розробки нових методів фізичних досліджень наносистем з розмірами елементів у кілька нанометрів.

Фотоіндуковане дефектоутворення в тонких плівках халькогенідів миш'яку

М.В. Шпотюк^{1,2}, О.Й. Шпотюк¹, В.О. Балицька³

¹Науково-виробниче підприємство „Карат”, вул. Стрийська, 212, Львів, Україна

*²Національний університет „Львівська політехніка”,
вул. Бандери, 212, Львів, Україна*

*³Львівський державний університет безпеки життєдіяльності,
вул. Клепарівська, 35, Львів, Україна*

В даній роботі було критично переглянуто ефект впливу фотоопромінення щільним світлом на розподіл ковалентних хімічних зв'язків у халькогенідних стеклах у сукупності з відповідною зміною локальної атомної координації (утворення координаційних топологічних дефектів) на прикладі напівпровідникових тонких плівок халькогенідів миш'яку на противагу нещодавно представленої точки зору М. Мунзара та Л. Тіши [1]. Зокрема, було екзаменовано наступні аспекти фотоструктурних перетворень:

(1) кінетичні залежності ефекту фотопотемніння (довгохвильовий зсув фундаментального краю оптичного поглинання), визначеного за змінами (i) оптичного пропускання, (ii) коефіцієнта оптичного поглинання, (iii) ширини оптичної забороненої зони;

(2) феноменологія ефекту з точки зору кінетики фотоструктурних змін (порівняння кінетики першого та другого порядку);

(3) найбільший можливий відгук на фотоопромінення (оцінка концентрації дефектів);

(4) часова нестабільність індукованих змін (ефект спонтанного та стимульованого самостирання фотоіндукованих ефектів);

(5) ефект топологічної реорганізації локальних атомних конфігурацій.

У роботі запропоновано нову формулу для оцінки кількості фотоіндукованих дефектів в тонких плівках халькогенідів на противагу до нереалістичного підходу, представленого в [1]. Показано, що концентрація дефектів залежить від енергії розірваного ковалентного зв'язка, енергії переключення зв'язків, кореляційної енергії, ширини оптичної забороненої зони та енергії світла, яким опромінювали зразок. За результатами розрахунків, максимальна концентрація дефектів у тонких плівках триселеніду миш'яку є несуттєвою, в той час як у трисульфіді миш'яку може досягати декількох відсотків.

[1] M. Munzar, L. Tichy. Kinetics of photo-darkening and self-bleaching in amorphous As_2S_3 and As_2Se_3 thin films // *Phys. Stat. Sol. (RRL)*, 1(2), pp. R74–R76 (2007).

Structure of Se-based vitreous semiconductors by solid state ^{77}Se nuclear magnetic resonance spectroscopy

B. Bureau¹, L. Calvez¹, R. Golovchak², O. Shpotyuk²

¹*Laboratoire des Verres et Ceramiques UMR-CNRS 6512, University of Rennes 1, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes cedex, France*

²*Lviv Sci.&Res. Institute of Materials of SRC "Carat" 202, Stryjska str. Lviv, 79031, Ukraine*

Selenium-based vitreous semiconductors are very perspective materials for applications in modern optoelectronics due to their high transparency in IR region of spectra and numerous induced phenomena proper to these disordered materials. However, structural organization within Se-based vitreous semiconductors is still a matter of intensive debates in a scientific literature, because of lack of suitable experimental techniques capable to unambiguously reveal structure of these compounds. In this connection, solid state ^{77}Se nuclear magnetic resonance (NMR) technique provides a vital information on the nearest surrounding of selenium atoms, which allows development of structural models for Se-based vitreous semiconductors and possible changes under various external influences.

In present report, structural development within the binary Se-based vitreous semiconductors of As-Se and Ge-Se families is analyzed by solid state ^{77}Se NMR measurements. The changes in the structure of these materials caused by long-term natural storage (physical ageing) are discussed. The ^{77}Se NMR experiments were carried out at room temperature on an ASX 300 Bruker spectrometer operating at 57.3 MHz with a 2.5 mm Magic Angle Spinning probe rotating at 22 kHz. Due to the breadth of the NMR lines for glasses, a Hahn spin echo sequence was applied to refocus the whole