

УДК 535.36

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СЛОЖНОГО ОКСИДА

$\text{Rb}_{0.95}\text{Nb}_{1.375}\text{Mo}_{0.625}\text{O}_{5.79}$

Мажукина К. А., Волкова Н. С. (Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского)

Научный руководитель – доцент кафедры ФПЭН, к.ф.-м.н. Горшков А. П.  
(Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского)

**Аннотация.** В поликристаллическом образце  $\text{Rb}_{0.95}\text{Nb}_{1.375}\text{Mo}_{0.625}\text{O}_{5.79}$ , полученным методом твердофазного синтеза, были исследованы спектры диффузного отражения и пропускания, а также закономерности фотохромного эффекта в широком диапазоне температур. Установлено, что  $\text{Rb}_{0.95}\text{Nb}_{1.375}\text{Mo}_{0.625}\text{O}_{5.79}$  является непрямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны - 3 эВ. Определены некоторые характеристики глубоких дефектов и уточнено положение уровня Ферми в запрещенной зоне.

**Введение.** Одним из применений полупроводниковых материалов является их использование в фотокатализе, механизм которого заключается в следующем: при облучении фотокатализатора излучением, в нем в результате собственного или примесного поглощения образуются свободные носители заряда, которые способствуют протеканию окислительно-восстановительных реакций на поверхности. Сложные оксиды могут обладать некоторыми преимуществами, по сравнению с традиционно применяемыми фотокатализаторами, такими как  $\text{TiO}_2$ ,  $\text{ZnO}$ ,  $\text{WO}_3$  и др. Например  $\text{TiO}_2$ , из-за большой ширины запрещенной зоны не поглощает свет в видимой области спектра. Несмотря на то, что ширина запрещенной зоны большинства сложных оксидов так же превышает 3 эВ, в некоторых веществах существуют дополнительные энергетические уровни в запрещенной зоне, которые расширяют область поглощения в видимый диапазон, и, тем самым, могут способствовать более полному использованию солнечного спектра. Поскольку вещество новое и получено сравнительно недавно, необходимо исследовать его оптические свойства, причем важно не только определение ширины запрещенной зоны, но и получение информации о характеристике примесей и дефектов, именно они, как известно, определяют многие свойства полупроводников. Роль дефектов в фотокатализе неоднозначна. С одной стороны они могут снижать его эффективность, так как создают дополнительный канал безызлучательной рекомбинации, и следовательно, препятствуют достижению электронами и дырками поверхности полупроводника и их участию в фотохимических реакциях. С другой стороны примесное поглощение расширяет диапазон fotocувствительности полупроводника, поэтому может увеличивать эффективность фотокатализа. Будут ли дефекты положительно или отрицательно влиять на фотокаталические свойства материала, зависит от их концентрации и положения в запрещенной зоне.

**Основная часть.** Поскольку синтезируемое вещество получается в виде порошка, что не позволяет применить большинство методов, требующих хороших электрических контактов, в данной работе информация об электронной структуре  $\text{Rb}_{0.95}\text{Nb}_{1.375}\text{Mo}_{0.625}\text{O}_{5.79}$  была получена исключительно оптическими методами: спектроскопией диффузного отражения и пропускания, а также по температурной зависимости фотохромного эффекта.

Для оптических измерений порошок  $\text{Rb}_{0.95}\text{Nb}_{1.375}\text{Mo}_{0.625}\text{O}_{5.79}$  был спрессован в таблетку диаметром 2 см и толщиной 1 мм. Исследования проводились в диапазоне 250 – 2500 нм с использованием спектрофотометра Shimadzu RF-6000 и монохроматора Acton SpectraPro-500. Ширина запрещенной зоны определялась по спектру диффузного отражения, на котором в диапазоне энергий фотонов 3,1 – 3,6 эВ наблюдалось резкое падение отражения, связанное с появлением и увеличением межзонного поглощения света. Спрямление функции Кубелки-Мунка наблюдалось в координатах, соответствующих непрямозонному полупроводнику, и ширина запрещенной зоны составила 3 эВ. Для исследования

относительно слабого поглощения в примесно-дефектной области использовался спектр пропускания. Было обнаружено, что образец практически полностью непрозрачен при энергиях фотонов больше 1,6 эВ. В диапазоне 1.6 – 1 эВ наблюдается резкое увеличение прозрачности образца, которое свидетельствует о наличии глубокого электронного уровня, расположенного на 1 эВ от края одной из разрешенных зон, например, ниже дна зоны проводимости. При облучении образца фиолетовым лазером (405 нм) наблюдался фотохромный эффект, проявляющийся в затемнении облучаемой области образца. Это затемнение наиболее сильно было выражено при энергиях фотонов больше 1 эВ, что совпадает с длинноволновым порогом примесно-дефектного поглощения образца и указывает на связь фотохромного эффекта с изменением зарядового состояния примесного уровня. Затемнение оказалось обратимым и исчезало в течение нескольких недель при комнатной температуре и намного быстрее при повышенных температурах. Изучение температурной зависимости релаксации фотохромного эффекта выявило наличие двух разных времен с одинаковыми энергиями активации, которая составила 0,9 эВ. Данная закономерность может быть объяснена наличием в образце областей слабого В сильного электрического поля. Последние, вероятно, располагаются вблизи поверхности зерен и связаны с высокой плотностью поверхностных состояний на их границе.

**Вывод.** Было установлено, что исследуемый образец – непрямозонный полупроводник с шириной запрещенной зоны 3 эВ. Обнаружено сильное примесно-дефектное поглощение, связанное с глубоким уровнем, расположенным на 1 эВ от края одной из разрешенных зон. Уточнен диапазон энергий, в соответствующем расположению уровня Ферми. Полученная информация об электронных свойствах  $\text{Rb}_{0.95}\text{Nb}_{1.375}\text{Mo}_{0.625}\text{O}_{5.79}$  позволяет сделать вывод о возможности применения данного соединения в качестве фотокатализатора, использующего не только ультрафиолетовую, но и видимую часть солнечного спектра.

Мажукина К. А. (автор)

Горшков А. П. (научный руководитель)