

**ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРНОГО ЭФФЕКТА НА ЗОННУЮ СТРУКТУРУ  
НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ТЕЛЛУРИДА МЕДИ – ПЕРСПЕКТИВНОГО  
МАТЕРИАЛА ДЛЯ НАНОСЕНСЕРОВ**

**Комарова Наталья Геннадьевна**

студент магистратуры

научный руководитель: **Биккулова Нурия Нагимьяновна**

доктор физико-математических наук

Стерлитамакский филиал Башкирского государственного университета, г. Стерлитамак

**Аннотация.** В данной статье раскрываются понятие и особенности теллурида меди, а также влияние размерного эффекта на зонную структуру нанокристаллического теллурида меди.

**Ключевые слова:** размерный эффект, теллурид меди, наносенсор, зонная структура, теллур.

Нанокристаллические сплавы любого характера имеют более сложные структуры и улучшенные характеристики, наряду с привычными элементами. Они изменяются и имеют немного различные характеристики и результаты при проведении экспериментов над их составляющими. Множество эффектов имеют иное влияние на нанокристаллические структуры, в том числе, это касается и размерного эффекта.

Для более подробного и качественного раскрытия темы, для начала необходимо рассмотреть основные понятия и особенности.

Теллурид меди – неорганическое соединение двух химических элементов – меди и теллура. Их формула –  $\text{CuTe}$ . Внешне выглядит как желтые кристаллы правильной формы, так как имеет место принцип ромбической сингонии. В природе встречается в виде примесей в вулканите, а в лабораториях получается за счет спекания при высоких температурах. При стандартных параметрах, имеют большие значения боровского радиуса, по сравнению с другими бинарными соединениями [2].

Нанокристаллические сплавы обладают особой аморфно-кристаллической структурой, поэтому влияние, такое как размерный эффект или подобные по характеристикам, на них может полностью изменить. Нанокристаллические сплавы имеют отличительные характеристики, такие как устойчивость к повреждениям от множества негативных эффектов, которые влияют на стандартные сплавы.

Зонная теория предназначена для объяснения движения всех электронов в твердых телах, вне зависимости от их происхождения. Благодаря ей, в квантовой механике есть

утверждение, что электроны имеют абсолютно любую энергию, а их энергетический спектр является непрерывным явлением. Если говорить за электроны, которые относятся к атомам, находящимся в изоляции, то их энергия обязательно является дискретной. В зависимости от плотности тела, энергия электронов будет отличаться, а также будет изменяться их поведение.

Подобная теория имеет свое начало из постулатов Бора, в которых есть утверждение о дискретной энергии электрона. Если атомы имеют некую связь, то все орбитали начинают расщепляться, их число и траектории начинают достигать параметров, пропорциональных количеству связей. При объемных соединениях, появляется большое облако энергий. Когда электроны разительно отличаются по количеству энергии в них, возникает зона с определенной энергетической развязкой. Кроме того, зонная теория предполагает следующее:

- Твердое тело можно разделить на идеальные кристаллы, пропорциональные по своим размерам;
- Все вопросы, которые касаются многоэлектронных задач, можно легко сместить до одноэлектронных, без потери точности;

Энергетические спектры рассчитываются по методу приближения за счет формулы Шредингера. Более того, есть множество методов, чтобы рассчитать зонную структуру более точно: использовать функцию Грина; с помощью метода псевдопотенциала; используя комбинации различных линейных орбиталей; множество интерполяционных схем.

Размерный эффект – особенность, которая проявляется из-за изменений в свойствах материала. Так, например, это происходит тогда, когда любой параметр можно применять к аналогичному, но атомарному. Есть классические, максимально распространенные эффекты:

- Чем меньше диаметр кристаллов, тем более прочные они становятся, за счет исчезновения множества дефектов, таких как дислокации;
- Проявление магнитных эффектов изменяется и смещается к размеру орбиты электронов, которые отвечают за проводимость в твердых телах;
- Общая проводимость структур начинает изменяться за счет смены положения и количества кристаллов.

Размерный эффект увеличивается с постепенным уменьшением структуры. Именно поэтому, его влияние будет больше в случае наличия нанокристаллического сплава. При стандартном уменьшении нанокристаллического сплава, его люминесценции начинают плавно смещаться в сторону высоких энергий. Дополнительно, эта зона известна как коротковолновая. Кулоновские силы продолжают действовать, что становится причиной возникновения экситона, что в свою очередь, ослабляет и замедляет данный переход. При этом, носители зарядов подвергаются воздействию таких эффектов, как туннелирование.

Если перейти на язык формул из квантовой механики, то весь процесс вновь легко описывается формулой Шредингера через волновую функцию. Благодаря теориям квантовой

механики, точно установлено, что даже в период, когда энергия частицы начинает снижаться, однако, ее уровень выше за барьер, то коэффициент отражения продолжает существовать отменным от нулевого значения. При этом, данная теория касается частиц, которые по своим характеристикам не имеют свойства к отражению. Существование такого эффекта и описывается туннельным переходом или эффектом.

Похожие изменения в особенностях структур нанокристаллических сплавов, говорят о том, что размерный эффект влияет и на зонную структуру материала. Если при обычном состоянии существует стандартное количество зон, которые имеют четкие свойства и переходы, то при уменьшении параметров и вступлении в ход размерного эффекта, зонная теория изменяется для подобного материала.

За счет того, что кристаллы становятся более вытянутыми, прочными и частично меняют свои характеристики, зоны электронной энергии также начинают смещаться. Некоторые из них могут становиться больше и частично поглощать другие за счет размерного эффекта. Слабые зоны могут не наблюдаться или пребывать в более активном взаимодействии с другими. Спектр люминесценции переход в более высокий и это повышает магнитное сопротивление теллурида меди. Кроме того, электроны вбирают больше энергии, что приводит к уменьшению дефектов и изменениям длины волны влияния.

#### **Список литературы:**

1. Пушкарев О.И., Кулик О.Г., Никуйко Л.А. Размерный эффект и его влияние на микромеханические свойства абразивных материалов. Диагностика материалов. 2017; С. 49-52.
2. Суздалев И.П. Нанотехнология: Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов, Изд.2-е. – М.: «Либроком» 2009. –592 с.
3. Чижигов Д.М., Счастливый В.П. Теллур и теллуриды. – М.: Наука, 1966. – 280 с.

---

**ISSN 2541-9250**

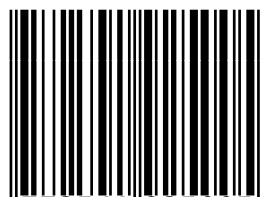
**НАУКА ЧЕРЕЗ ПРИЗМУ ВРЕМЕНИ**

Международный научный журнал

Ежемесячное научное издание

№7 (40) 2020

ISSN 2541-9250



9 772541 925005 >

---

**Библиографическое описание статьи:**

Комарова Н.Г. Влияние размерного эффекта на зонную структуру нанокристаллического теллурида меди – перспективного материала для наносенсоров // Наука через призму времени. – 2020. – №7 (40). – С. 5-7



<http://www.naupri.ru/journal/2611>

---

© Комарова Н.Г., 2020

© Редакция научного журнала «Наука через призму времени», 2020