

Л.А. Дворіна, Ю.М. Макогон*, О.П. Павлова*, А.І. Стецун

Густина електронних станів тонкої плівки аморфного дисиліциду хрому

*Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України,
вул. Кржижановського, 3, м. Київ - 142, 03680, Україна*

** Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут",
Проспект Перемоги, 37, м. Київ - 56, 03056, Україна*

На основі спектральної залежності коефіцієнта поглинання аморфного шару дисиліциду хрому, дослідженої в попередніх роботах, розрахована густина електронних станів. Одержані результати про густину електронних станів аморфного дисиліциду хрому добре корелюють із відомими даними про густину електронних станів монокристалу дисиліциду хрому.

Ключові слова: дисиліцид, електронні стани.

Стаття поступила до редакції 10.01.2007; прийнята до друку 15.02.2008

Для здійснення фундаментального дослідження властивостей силіцидів перехідних металів та практичного застосування цих сполук у сучасній техніці необхідно знати розподіл густини електронних станів. Густина електронних станів дає безпосередню інформацію про хімічні зв'язки досліджуваних матеріалів та про комплекс інших властивостей, пов'язаних із специфікою хімічних зв'язків. Отже, густина електронних станів є важливою фізичною характеристикою.

Одним із найважливіших дисиліцидів з точки зору практичного застосування є дисиліцид хрому. До сьогодні густину електронних станів досліджено для монокристалічного дисиліциду хрому [1]. Через труднощі методичного характеру розрахунків густини електронних станів аморфного дисиліциду хрому не виконувалася. Задача розрахунку густини електронних станів аморфного дисиліциду хрому вирішується в даній роботі.

Методику розрахунку густини електронних станів для аморфних напівпровідників, яка буде використовуватися в цій роботі, було розроблено в науковій статті [2]. Така методика забезпечує добру відповідність результатів теоретичного розрахунку з експериментальними результатами. Ця методика базується на теоретичному розрахунку, виходячи із спектральної залежності оптичної постійної $\epsilon_2(\hbar\omega)$, одержаної експериментально. Тут оптична постійна

$$\epsilon_2 = 2nk, \quad (1)$$

де n – показник заломлення, k – коефіцієнт поглинання.

Враховуючи сучасний стан літературних джерел із цього наукового напрямку методику розрахунку,

можна викласти наступним чином. У відомій монографії Лауреата Нобелівської премії Н.Мотта та Е.Девіса [3] одержано формулу для коефіцієнта поглинання аморфного напівпровідника

$$\alpha(\omega) = \frac{8\pi^4 e^2 \hbar a}{ncm^2} \int \frac{N_v(E)N_c(E + \hbar\omega)}{\hbar\omega} dE \quad (2)$$

де $N_v(E)$ – густина електронних станів у валентній зоні, $N_c(E + \hbar\omega)$ – густина електронних станів у зоні провідності, a – середнє значення міжатомної відстані, c – швидкість світла, e – заряд електрона, n – показник заломлення.

У монографії Н.Мотта та Е.Девіса було проведено теоретичний аналіз щодо спектральної залежності матричного елемента для аморфних матеріалів. На основі такого аналізу показано, що матричний елемент електронного переходу може бути визначений, як

$$D = \pi \left(\frac{a}{\Omega} \right)^{1/2} \quad (3)$$

де a – середнє значення міжатомної відстані, Ω – об'єм зразка. Так встановлено, що для аморфних матеріалів спектральна залежність матричного елемента не впливає на спектральну залежність коефіцієнта поглинання.

Враховуючи вираз для коефіцієнта поглинання у вигляді

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (4)$$

де λ – довжина світлової хвилі та формулу для ϵ_2 у вигляді із залежності (2), можна одержати вираз для ϵ_2

$$\varepsilon_2 = \frac{8\pi^4 e^2 \hbar^2 a}{m^2 \hbar^2 \omega^2} \int N_v(E) N_c(E + \hbar\omega) dE \quad (5)$$

Виходячи з наведеної формули шляхом математичних перетворень можна одержати розподіл густини електронних станів у валентній зоні, якщо врахувати такі експериментальні факти. Автори роботи [2] показали, що найбільш точною апроксимацією густини електронних станів у зоні провідності при віддаленні на деяку відстань від краю зони для аморфного германія та кремнію є постійна величина.

Крім того, у [4] показано, що густина станів у зоні провідності для деяких аморфних халькогенідних напівпровідників добре апроксимується сходинкоподібною функцією. Для того, щоб порівняти експериментально виміряну та теоретично розраховану спектральні залежності коефіцієнта поглинання халькогенідних напівпровідників, автори цієї роботи в теоретичному виразі для коефіцієнта поглинання моделювали густина електронних станів двома способами. У першому випадку в якості функції розподілу електронних станів зони провідності обрано функцію симетричну до густини станів у валентній зоні. Густина станів у валентній зоні одержували на основі досліджень рентгенівської фотоemisійної спектроскопії. У другому випадку в якості функції розподілу електронних станів у зоні провідності обрано сходинкоподібну функцію. Було встановлено, що сходинкоподібна функція є більш точною апроксимацією густини станів у зоні провідності, яка дає більш точний збіг експериментальних результатів із теоретичним розрахунком.

Отже, на основі досліджень ряду аморфних напівпровідників встановлено, що сходинкоподібна функція є хорошою апроксимацією густини електронних станів у зоні провідності для ряду аморфних напівпровідників [2, 4]. Тому можна припустити, що для аморфних силіцидів перехідних металів ця апроксимація є коректною.

Тоді, помноживши обидві частини виразу (5) на $(\hbar\omega)^2$ та продиференціювавши їх, одержимо вираз, на основі якого можна розрахувати густина електронних станів у валентній зоні:

$$N_v(E_g - \hbar\omega) = \text{const} \frac{d}{d(\hbar\omega)} [(\hbar\omega)^2 \varepsilon_2(\hbar\omega)] \quad (6)$$

Спектральну залежність $\varepsilon_2(\hbar\omega)$ для аморфного та полікристалічного дисиліциду хрому було досліджено в науковій статті [5].

Виходячи із спектральної залежності $\varepsilon_2(\hbar\omega)$ для аморфного дисиліциду хрому, на основі формули (6) за допомогою чисельного диференціювання розраховано густина електронних станів. Результати розрахунку представлені графічно на рис. 1. У густині електронних станів валентної зони аморфного дисиліциду хрому спостерігаються максимуми при 1.4 eV, 3.3 eV та мінімум при 4.1 eV. Залежність густини електронних станів валентної зони аморфного дисиліциду хрому корелює з

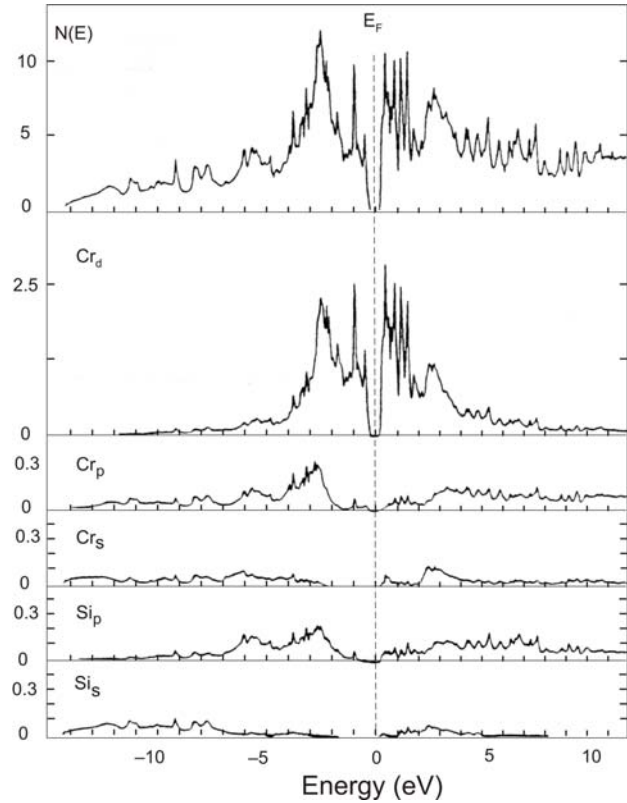


Рис. 1. Густина електронних станів для аморфного CrSi₂.

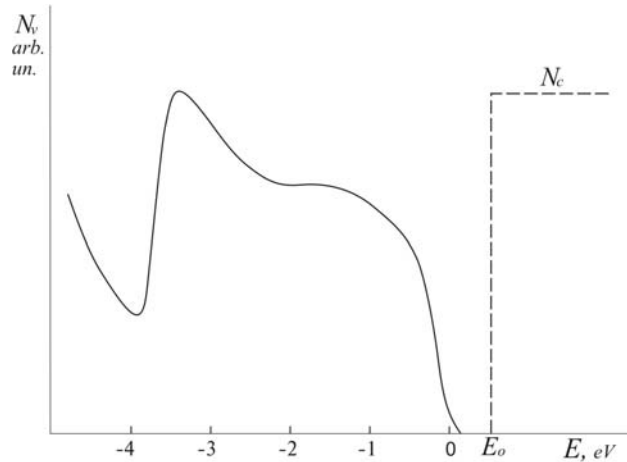


Рис. 2. Густина електронних станів для монокристалічного CrSi₂ та парціальні густини електронних станів за даними роботи [1].

густиною станів монокристалічного дисиліциду хрому, наведеною в роботі [1] з урахуванням відмінностей в особливостях спектральних залежностей $\varepsilon_2(\hbar\omega)$. Порівняно з монокристалічним CrSi₂, в аморфному матеріалі гострі піки зглажено, що характерно для аморфних матеріалів, але відносно загального вигляду густини електронних станів спостерігається кореляція.

У роботі [1], де розраховувалась густина електронних станів монокристалічного дисиліциду хрому, були розраховані внески у густина електронних станів від d-електронів хрому, від p-електронів хрому, від s-електронів хрому, від p-

електронів кремнію та від s-електронів кремнію (рис. 2). Порівняння цих внесків з одержаною в цій роботі графічною залежністю для густини електронних станів у валентній зоні аморфного дисиліциду хрому показує, що основний внесок у

густину електронних станів аморфного дисиліциду хрому в дослідженому енергетичному інтервалі дають d-електрони хрому.

- [1] V. Bellani, G. Guizzetti, F. Marabelli et al. Theory and experiment on the optical properties of CrSi₂ // *Phys. Rev. B.*, **46 (I)**, p. 9380-93889 (1992).
- [2] W. Paul, G. A.N. Connel and R.J. Temkin. Amorphous germanium. A model for the structural and optical properties// *Advances in Physics.*, **22**, p. 531-580 (1973).
- [3] Н. Мотт, Э. Дэвис. *Электронные процессы в некристаллических веществах*. Мир, М. 664 с. (1982).
- [4] Н. Hoshi, Y. Suzuki, M. Hirai. UV absorption shape between 3.5 and 5.6 eV in very thin a-As₂S₃ films at 80⁰ K// *J. Non-Cryst. Solids.*, **95-96**, p. 749-754 (1987).
- [5] М.В. Белоус, Ю.В. Кудрявцев, Ю.Н. Макогон и др. Оптические свойства аморфных и поликристаллических пленок дисиліцида хрому// *Металлофизика и новейшие технологии*, **18**, 74-78 (1996).

L.A. Dvorina, Yu.N. Makogon, E.P. Pavlova, A.I. Stetsun

Density of Electron States of Amorphous CrSi₂

Density of electron states of amorphous CrSi₂ is calculated using absorption coefficient spectral dependence investigated in previous works. This density of electron states good correlates with density of electron states for monocrystalline CrSi₂.