

А.І. Стецун

Густина електронних станів аморфної плівки дисиліциду молібдену

*Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, вул. Кржижановського, 3,
м. Київ - 142, 03680, Україна, e-mail: stetsun387@gmail.com*

Дана робота присвячена розрахунку густини електронних станів аморфної плівки дисиліциду молібдену. Для цього використовувались формули, одержані на основі теорії Нобелівського Лауреата Н. Мотта та Е. Девіса. Встановлено, що електронні стани у вершині валентної зони даного матеріалу обумовлені d-елекtrонами молібдену, р-елекtrонами кремнію та р-елекtrонами молібдену.

Ключові слова: аморфна плівка, дисиліцид молібдену.

Стаття постуила до редакції 15.06.2016; прийнята до друку 30.08.2016.

Вступ

Дисиліцид молібдену використовується для виготовлення елементів електроніки, при виробництві інтегральних схем [1-3]. Із цього матеріалу виготовляють жаростійкі покриття для ракетної техніки. Типове застосування силіцидів в електроніці полягає в використанні тонких плівок цих матеріалів. Добре відомо [4], що тонкі плівки силіцидів, нанесені на ненагріту підкладку, знаходяться в аморфному стані. Тому важливо знати густину електронних станів дисиліциду молібдену в аморфному стані. Ця величина є важливою фундаментальною характеристикою даного матеріалу та обумовлює різні аспекти його технічного застосування.

I. Особливості розрахунку електронних станів

Методика розрахунку, яка використовувалась в даній роботі, була вперше розвинута в класичній публікації [5]. Використання теорії Нобелівського Лауреата Н. Мотта та Е. Девіса [6] дає можливість незалежно одержати практично ідентичну кінцеву формулу для розрахунку, що було показано в роботах [7, 8]. З цією метою використовувався вираз для оптичної провідності аморфної плівки у вигляді, запропонованому в роботі [6]:

$$s(w) = \frac{2pe^2\hbar^2\Omega}{m^2w} \int |D|^2 N(E)N(E+\hbar w)dE, \quad (1)$$

де m – маса електрона, e – заряд електрона, E – енергія, N – густина електронних станів у валентній зоні чи в зоні провідності, w – частота світла, D – матричний елемент переходу, Ω – об'єм зразка.

Шляхом ряду перетворень та наближень була одержана формула для розрахунку густини електронних станів:

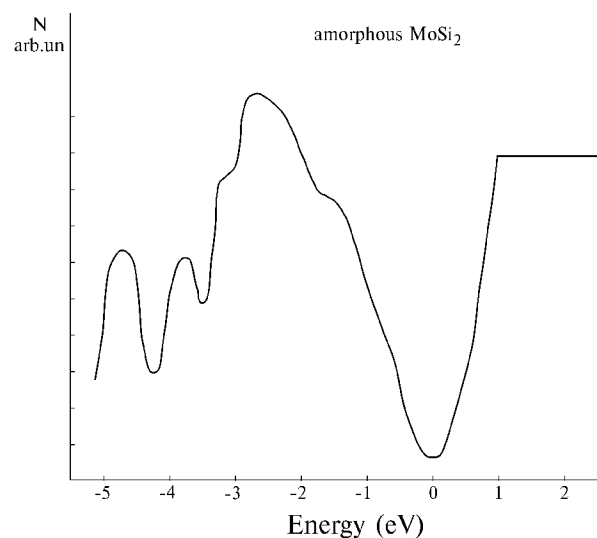


Fig. 1. The density of electron states for amorphous MoSi₂.

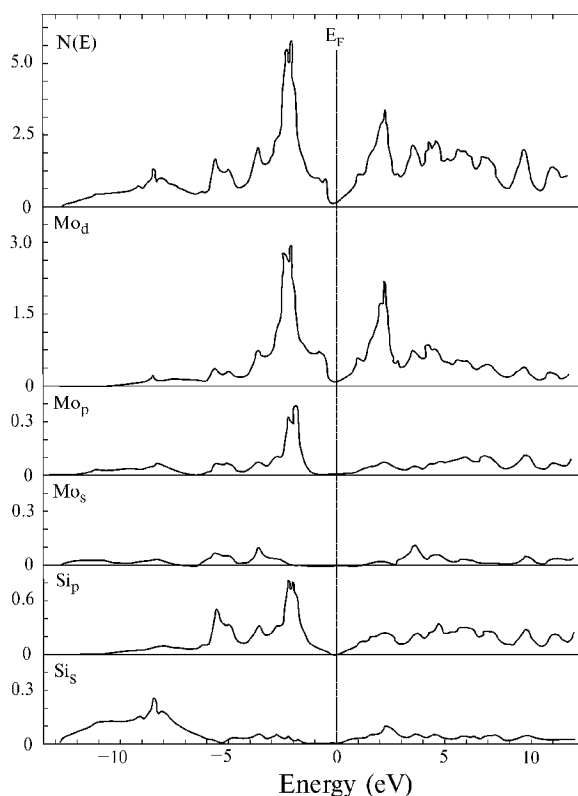


Fig. 2. Electron structure and density of electron states for tetragonal phase of MoSi₂ [10].

$$N_V(E_F - \hbar\omega) = \text{const} \frac{d}{d(\hbar\omega)} \left[(\hbar\omega)^2 e_2(\hbar\omega) \right], \quad (2)$$

де E_F - енергія Фермі, $\varepsilon_2(\hbar\omega)$ - спектральна залежність оптичної постійної уявної частини діелектричної проникності. При цьому, як було показано в теорії Н. Мотта та Е. Девіса, вважається, що матричний елемент переходу є постійним.

Залежність оптичної постійної $\varepsilon_2(\hbar\omega)$ була досліджена в широкому спектральному діапазоні для аморфної плівки MoSi₂ в роботі [9]. Використовуючи ці дані, була розрахована густина електронних станів

аморфної плівки MoSi₂. Результати розрахунку наведені на рис. 1. На рис. 2 наведені графіки густини електронних станів для кристалічного дисиліциду молібдену в тетрагональній модифікації, розраховані в роботі [10]. На цьому рисунку наведені також локальні парціальні густини станів. Для аморфного матеріалу характерно, що значна кількість гострих піків, які є в густині електронних станів кристалічного матеріалу, згладжені. При цьому спостерігається кореляція густини електронних станів в області основного піку у валентній зоні. Основні максимуми на кривій густини електронних станів аморфного дисиліциду молібдену знаходяться при 2,75 еВ, 3,75 еВ і 4,7 еВ. Відмінність в густині електронних станів аморфного та кристалічного матеріалу узгоджується з відмінністю в спектральних залежностях $\varepsilon_2(\hbar\omega)$ для цих матеріалів. Порівняння розрахункових залежностей, зображених на рис. 1 та рис. 2 показує, що властивості аморфного дисиліциду молібдену забезпечується d- та p-електронами молібдену, p-електронами кремнію, які формують вершину валентної зони дисиліциду молібдену.

Результати розрахунку густини електронних станів аморфного дисиліциду молібдену можуть бути використані для розрахунку провідності на постійному та змінному струмі, а також в оптоелектронних застосуваннях даного матеріалу.

Висновки

1. Застосування теорії аморфних станів Н. Мотта та Е. Девіса дає можливість розрахувати густину електронних станів аморфної плівки дисиліциду молібдену.

2. Вершина валентної зони аморфного дисиліциду молібдену обумовлена d- та p-електронами молібдену, p-електронами кремнію.

Стецун А.І. – кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник

- [1] Sh. M'jurarka, Silicidy dlja SBIS (Mir, Moskva, 1986).
- [2] Svoystva, poluchenie i primenenie tugoplavkih soedinenij. Spravochnik (Metallurgija, Moskva, 1986).
- [3] Novye materialy dlja mikroelektroniki. Sbornik nauchnyh trudov (IPM, Kiev, 1983).
- [4] L.A. Dvorina, I.V. Kud', V. Bretinajder, Poroshkovaja metallurgija 1, 81 (1987).
- [5] W. Paul, G. A.N. ConnelandR.J. Temkin, Advancesin Physics 22, 531 (1973).
- [6] N. Mott, Je. Djevis, Jelektronnye processy v nekristallicheskih veshhestvah (Mir, Moskva, 1982).
- [7] I.Z. Indutnyj, A.I. Stecun, Optika i spektroskopija 71(1), 83 (1991).
- [8] A.I. Stecun, Fizika i himija tverdogo tila 14(3), 553 (2013).
- [9] S.I. Sidorenko, Ju.M. Makogon, S.M. Voloshko, Materialoznavstvo tonkoplivkovih nanostruktur. Diffuzija i reakcii (Naukova dumka, Kiiv, 2000).
- [10] V.N. Antonov, B.Yu. Yavorsky, A.P. Shpak and A.Ya. Perlov, Low Temp. Phys. 20(9), 734 (1994).

А.І. Стецун

A.I. Stetsun

The Density of MoSi₂ Electron States for the Amorphous Film

*Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NASU, 3 Krzhyzhanovsky Str., Kiev, 03680,
Ukraine, e-mail: stetsun387@gmail.com*

The density of MoSi₂ electron states for the amorphous film has been calculated. An electron states at the top of valence band for this material are provided d electrons of molybdenum, p electrons of silicon and p electrons of molybdenum. d electrons of molybdenum are significant especially for physical properties of MoSi₂.

Keywords: amorphous film, dysylitsyd molybdenum.