

ГРАНИЦЫ КЛАСТЕРОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ АМОΡФНЫХ ПЛЕНКАХ: СРАВНЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА И ТЕОРИИ

Лыках В.А., Синельник А.В.

*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт»,
г. Харьков*

В проведенных нами экспериментах по осаждению тонких халькогенидных аморфных пленок $A^I\text{-}Bi\text{-}C^{VI}$ (A^I – Li, K, Na, Rb; C^{VI} – S, Se) на подложку при температуре 300 К было найдено, что пленки имеют аморфную структуру. Но в рамках аморфной фазы для разных химических составов происходило образование структуры с чередованием областей повышенной плотности (кластеры), которые разделены менее плотными и относительно тонкими слоями [1].

Ранее нами было выполнено теоретическое описание наблюдаемой экспериментально кластерной структуры аморфных пленок [2]. В качестве модели межатомных связей был выбран потенциал Леннарда-Джонса, в который был введен множитель, описывающий угол в ковалентной связи.

Для описания аморфной структуры были выбраны два параметра порядка: среднее отклонение угла ковалентной связи от оптимального среднего значения φ и среднее межатомное расстояние r . Для получения пространственных зависимостей $\varphi(x)$, $r(x)$ была введена свободная энергия системы. Вариация свободной энергии по параметрам порядка приводит к системе из двух дифференциальных уравнений Лагранжа. Решение дает зависимость параметров порядка, а также плотности пленки $\rho(x)$ от пространственной координаты x при переходе из одного кластера в другой.

Для сравнения с экспериментальными данными было выполнено фотометрирование электронно-микроскопических изображений пленки вдоль линии, которая перпендикулярна к границе между кластерами. Выполнена подгонка параметров в зависимости плотности от координаты по значениям плотности, полученных из экспериментальных данных. Подгонка параметров производилась с помощью алгоритма Левенберга-Марквардта, встроенного в пакет программ Origin.

Сравнение подгоночных кривых с экспериментальными данными показывает их хорошее соответствие. В результате подгонки можно восстановить параметры межатомного потенциала, а также ширину границы кластеров.

Литература:

1. Дьяконенко Н.Л., Лыках В.О., Корж І.А., Білозерцева В.І., Наноструктура аморфних плівок // Тези доповідей УНКФН-7, Дніпро, 2016, с. 330-331.
2. V. A. Lykah, N. L. Dyakonenko, A. V. Sinelnik, V. I. Bilozertseva, I. A. Korzh / Clusters and Boundaries in Chalcogenide Amorphous Films // Proc. of 7th International Conference Nanomaterials: Application & Properties (NAP – 2017), 10-15 September, 2017, Zatoka, Ukraine, Vol. 2, p.p. 02NTF17-1-4 (2017).