



УКРАЇНА

(19) UA (11) 87523 (13) C2
(51) МПК (2009)
G01N 21/59
G01N 25/00
H01L 21/66

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ
І НАУКИ УКРАЇНИ

ДЕРЖАВНИЙ ДЕПАРТАМЕНТ
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ
ВЛАСНОСТІ

ОПИС ДО ПАТЕНТУ НА ВИНАХІД

(54) СПОСІБ ВИЗНАЧЕННЯ ТЕМПЕРАТУРНОЇ ОБЛАСТІ ІСНУВАННЯ ПРОМІЖНОГО ПОРЯДКУ В СКЛОПОДІБНИХ НАПІВПРОВІДНИКАХ

1

(21) a200703943
(22) 10.04.2007
(24) 27.07.2009
(46) 27.07.2009, Бюл.№ 14, 2009 р.
(72) СТУДЕНЯК ІГОР ПЕТРОВИЧ, ШПАК ІВАН ІВАНОВИЧ
(73) ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД "УЖГОРОДСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ"
(56) Shpak I. I., Studenyak I. P., Kranjcec M. Optical absorption edge and structural disorder in electron - irradiated As₂S₃ chalcogenide glasses // J. Optoelectronics and Advanced Materials - 2003. - Vol.5, №5. - P.1135-1138.
Cody G. D., Tiedje T., Abeles B., Brooks B., Goldstein Y. Disorder and the optical - absorption edge of hydrogenated amorphous silicon // Phys. Rev. Lett. - 1981. - Vol.47, №20. - P.1480-1483.
Yang Z., Homewood K. P., Finney M. S., Harry M. A., Reeson K. J. Optical absorption study of ion beam synthesized polycrystalline semiconducting FeSi₂ // J. Appl. Phys. - 1995. - Vol.78, №3. - P.1958-1963.
Kurik M. V. Urbach rule (Review) // Phys. Stat. Sol. (a). - 1971. - Vol.8, №1. - P.9-30.
Захаров В. П., Герасименко В. С. Структурные особенности полупроводников в аморфном состоянии. - К.: Наукова думка, 1976. - с. 25-30.
a200603098, 15.06.2006
20041210849, 15.06.2005
UA 17695 A, 16.10.2006
RU 2019891 C1, 15.09.1994
Shapak I.I., Sokolyuk I.V., Hadmashy Z.P., Shtets P.P., Semak D.G. Structural disorder and optical

2

properties of electron-irradiated As₂S₃(Se₃) chalcogenide glasses // Ukr. J. Phys. Opt. - 2002. - V2. №4. - P.199-202

(57) Спосіб визначення температурної області існування проміжного порядку в склоподібних напівпровідниках, який включає експериментальні дослідження фізичних властивостей склоподібних напівпровідників, який відрізняється тим, що проводять температурні дослідження краю оптичного поглинання склоподібних напівпровідників і представляють енергетичну ширину w краю оптичного поглинання у вигляді

$$w = w_T + (w_X)_{\text{stat}} + (w_X)_{\text{dyn}},$$

після чого визначають внески температурного w_T , статичного структурного розупорядкування $(w_X)_{\text{stat}}$ та динамічного структурного розупорядкування $(w_X)_{\text{dyn}}$ при певній температурі T за отриманими при описі температурної залежності w параметрами постійних величин досліджуваного матеріалу w_0 , w_1 та температурою Ейнштейна θ_E

$$w_T = w_1 [\exp(\theta_E / T) - 1], \quad (w_X)_{\text{stat}} = w_0, \\ (w_X)_{\text{dyn}} = w - w_T - (w_X)_{\text{stat}}.$$

після чого за температурною областю, для якої $(w_X)_{\text{dyn}} = 0$, визначають область існування проміжного порядку в склоподібних напівпровідниках.

Винахід відноситься до області фізики твердого тіла, зокрема до способів дослідження процесів порядок-безпорядок в твердих тілах, і може бути використаний як ефективний та надійний

спосіб визначення температурної області існування проміжного порядку в склоподібних напівпровідниках шляхом температурних досліджень краю оптичного поглинання.

(19) UA (11) 87523 (13) C2

Відомо, що для багатьох склоподібних напівпровідників поглинання поблизу краю оптичного поглинання зростає за експоненціальним законом. Більше того, для ряду склоподібних напівпровідників було встановлено, що температурно-спектральна залежність коефіцієнта поглинання α описується правилом Урбаха [1]:

$$\alpha(h\nu, T) = \alpha_0 \cdot \exp\left[\frac{h\nu - E_0}{w(T)}\right] \quad (1),$$

де w - енергетична ширина краю оптичного поглинання; α_0 та E_0 - координати точки збіжності урбахівського "віяла"; $h\nu$ - енергія кванта падаючого світла; T - температура.

Температурна поведінка енергетичної ширини w в моделі Ейнштейна описується за допомогою співвідношення [2]:

$$w = w_0 + w_1 \left[\frac{1}{\exp(\theta_E / T) - 1} \right] \quad (2),$$

де w_0 та w_1 - деякі постійні величини, θ_E - температура Ейнштейна, яка відповідає усередненій частоті фононних збуджень системи невзаємодіючих осциляторів.

Енергетична ширина урбахівського краю оптичного поглинання твердих тіл, як відомо, визначається не тільки температурним, але й структурним розупорядкуванням [3]:

$$w(T, X) = K \left(\langle u^2 \rangle_T + \langle u^2 \rangle_X \right) \quad (3),$$

де K - константа, $\langle u^2 \rangle_T$ та $\langle u^2 \rangle_X$ - середньоквадратичні відхилення (зміщення) атомів від їх рівноважних позицій, викликані відповідно температурним та структурним розупорядкуванням твердотільної системи. Оскільки зміщення атомів від рівноважних позицій веде до зміни електричного потенціалу системи, то формулу (3) записують як

$$w = k_0 (W_T^2 + W_X^2) = w_T + w_X \quad (4),$$

де k_0 - константа, W_T^2 та W_X^2 - середньоквадратичні відхилення від електричного потенціалу ідеально впорядкованої структури, викликані відповідно температурним та структурним розупорядкуванням, а внески температурного w_T та структурного w_X розупорядкування в w вважаються незалежними, еквівалентними та адитивними. Структурне розупорядкування у склоподібних напівпровідниках можна представити у вигляді суми двох складових - статичного структурного розупорядкування $(w_X)_{\text{stat}}$ та динамічного структурного розупорядкування $(w_X)_{\text{dyn}}$, причому внесок температурно - незалежного статичного структурного розупорядкування $(w_X)_{\text{stat}}$ викликаний відсутністю дальнього та наявністю тільки ближнього порядку у розташуванні атомів, а внесок температурно - залежного динамічного структурного розупорядкування $(w_X)_{\text{dyn}}$ викликаний відсутністю проміжного порядку.

Однак, в деяких склоподібних напівпровідниках спостерігається відхилення від урбахівської поведінки краю поглинання. Так, наприклад, при дослідженні краю оптичного поглинання склоподібного напівпровідника As_2S_3 виявлено дві характерні температурні області: область паралельного довгохвильового зміщення краю оптичного поглинання в інтервалі температур $80 \leq T < 300\text{K}$ та область урбахівської поведінки краю поглинання при $T \geq 300\text{K}$ [4]. Паралельне довгохвильове зміщення краю оптичного поглинання в As_2S_3 пов'язується з відсутністю проміжного порядку в розташуванні атомів у вказаній температурній області.

Найбільш близьким до запропонованого способу визначення температурної області існування проміжного порядку в склоподібних напівпровідниках є дифракційний метод, який полягає у знаходженні кривих радіального розподілу атомів та парціальних функцій розподілу, одержуваних з експериментів по дифракції електронного, рентгенівського, нейтронного випромінювання з довжиною хвилі порядку міжатомної відстані [5].

Недоліком методу є його низькі роздільна здатність і точність визначення парціальних функцій розподілу, вплив інтенсивних пучків рентгенівського випромінювання, електронів, нейтронів на метастабільну аморфну структуру, що приводить до спотворення характеристик проміжного порядку, а також неможливість врахування температурної та баричної поведінки проміжного порядку.

Завданням винаходу є створення способу визначення температурної області існування проміжного порядку в склоподібних напівпровідниках, який дозволяв би надійно та ефективно ідентифікувати відсутність або наявність проміжного порядку шляхом температурних досліджень краю оптичного поглинання.

Поставлене завдання досягається таким чином, що запропоновано спосіб визначення температурної області існування проміжного порядку в склоподібних напівпровідниках шляхом температурних досліджень краю оптичного поглинання, який включає фізичні експериментальні дослідження склоподібних напівпровідників, який відрізняється тим, що, проводять температурні дослідження краю оптичного поглинання склоподібних напівпровідників, представляють енергетичну ширину w краю оптичного поглинання у вигляді

$$w = w_T + (w_X)_{\text{stat}} + (w_X)_{\text{dyn}} \quad (5),$$

визначають внески температурного w_T , статичного структурного розупорядкування $(w_X)_{\text{stat}}$ та динамічного структурного розупорядкування $(w_X)_{\text{dyn}}$ за отриманими при описі температурної залежності w параметрами постійних величин досліджуваного матеріалу w_0 , w_1 та температурою Ейнштейна θ_E

$$w_T = w_1 / [\exp(\theta_E / T) - 1] \quad (6),$$

$$(w_X)_{\text{stat}} = w_0$$

$$(w_X)_{dyn} = w - w_T - (w_X)_{stat}$$

після чого за температурною областю, для якої $(w_X)_{dyn} = 0$, визначають область існування проміжного порядку в склоподібних напівпровідниках.

Запропонований спосіб визначення температурної області існування проміжного порядку в склоподібних напівпровідниках, у порівнянні зі способом-прототипом, є менш трудомістким та більш інформативним, який на основі температурних досліджень краю оптичного поглинання дозволяє надійно та ефективно ідентифікувати відсутність або наявності проміжного порядку.

Спосіб здійснюється наступним чином: спектрометричним методом досліджують спектральні залежності коефіцієнтів поглинання склоподібних напівпровідників при різних температурах. Потім розраховують енергетичну ширину краю оптичного поглинання w , а її температурну залежність апроксимують співвідношенням (2). За отриманими при описі експериментальної залежності $w(T)$ параметрами w_0 , w_1 та θ_E за допомогою співвідношень (2) і (6) визначають внески температурного w_T , статичного $(w_X)_{stat}$ та динамічного $(w_X)_{dyn}$ структурного розупорядкування. Температурна область, для якої $(w_X)_{dyn} = 0$, являється областю існування проміжного порядку в склоподібних напівпровідниках.

Приклад конкретного використання запропонованого способу.

За допомогою запропонованого способу ідентифіковано область існування проміжного порядку в склоподібному напівпровіднику As_2S_3 . Спектральні залежності коефіцієнтів пропускання T та відбиття здатності r досліджувалися за допомогою ґраткового монохроматора МДР-3, а значення коефіцієнтів поглинання α розраховувалися за формулою

$$\alpha = \frac{1}{d} \ln \left[\frac{(1-r)^2 + \sqrt{(1-r)^4 + 4T^2 r^2}}{2T} \right] \quad (7),$$

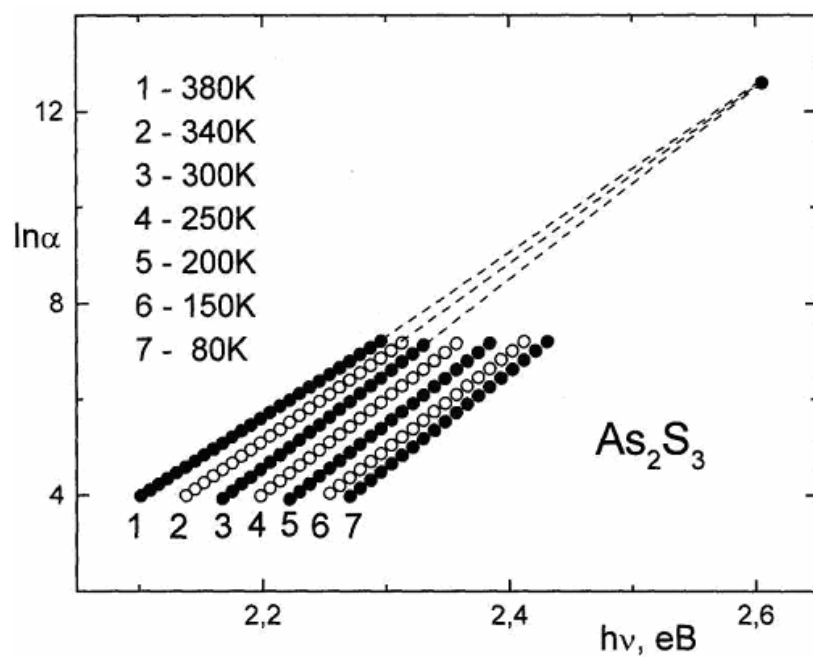
де d - товщина зразка. Характерне урбахівське "віяло" для кристала As_2S_3 наведено на Фіг.1. Потім розраховувалися значення енергетичної ширини експоненціального краю поглинання як $w = \Delta(h\nu) / \Delta(\ln \alpha)$, температурна залежність якої наведена на Фіг.2. Одержана температурна залежність w апроксимувалася за формулою (2) і визначалися внески температурного w_T , статич-

ного $(w_X)_{stat}$ та динамічного $(w_X)_{dyn}$ структурного розупорядкування за формулами (2) і (6). За температурною залежністю $(w_X)_{dyn}$ була визначена область відсутності або наявності проміжного порядку. За результатами досліджень встановлено, що в As_2S_3 проміжний порядок існує при $T \geq 300K$ (Фіг.2). Таким чином, при низьких температурах в досліджуваних склоподібних напівпровідниках має місце тільки ближній порядок у розташуванні атомів, а з підвищенням температури поступово встановлюється проміжний порядок, що приводить до зменшення $(w_X)_{dyn}$. Зменшення внеску динамічного структурного розупорядкування $(w_X)_{dyn}$ в сумі із зростаючим внеском температурного розупорядкування w_T при незмінному вкладі $(w_X)_{stat}$ приводить до температурної незмінності енергетичної ширини краю поглинання w (див. формулу (5)) та паралельного довгохвильового зміщення краю поглинання. При $T \geq 300K$ $(w_X)_{dyn} = 0$, а збільшення енергетичної ширини краю поглинання w визначається зростанням внеску температурного розупорядкування w_T .

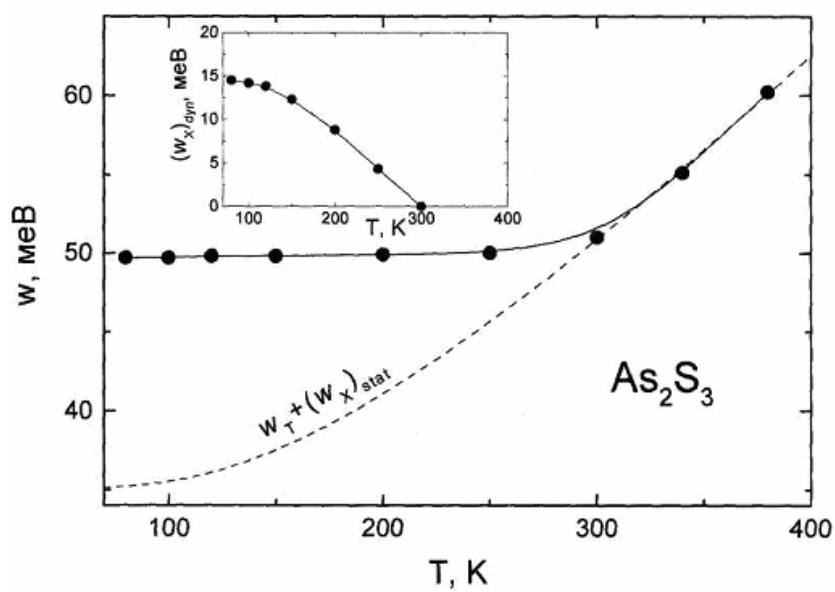
Винахід може бути використаний у науково-дослідних лабораторіях при дослідженні параметрів краю оптичного поглинання склоподібних напівпровідників з метою їх використання у ролі функціональних елементів для оптоелектроніки.

Джерела інформації:

1. Kurik M. V. Urbach rule (Review) // Phys. Stat. Sol. (a). - 1971. - Vol.8, №1. - P.9-30.
2. Yang Z., Homewood K.P., Finney M.S., Harry M.A., Reeson K.J. Optical absorption study of ion beam synthesized polycrystalline semiconducting $FeSi_2$ // J. Appl. Phys. - 1995. - Vol.78, №3. - P.1958-1963.
3. Cody G.D., Tiedje T., Abeles B., Brooks B., Goldstein Y. Disorder and the optical - absorption edge of hydrogenated amorphous silicon // Phys. Rev. Lett. - 1981. - Vol.47, №20. - P.1480-1483.
4. Shpak I.I., Studenyak I.P., Kranjcec M. Optical absorption edge and structural disorder in electron - irradiated As_2S_3 chalcogenide glasses // J. Optoelectronics and Advanced Materials - 2003. - Vol.5, №5. - P.1135-1138.
5. Захаров В.П., Герасименко В.С. Структурные особенности полупроводников в аморфном состоянии. - К.: Наукова думка, 1976. - с.25-30. - прототип.



Фиг. 1



Фиг. 2