

А.І. Стецун

## Густина електронних станів аморфної плівки силіциду нікелю

*Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України,  
вул. Кржижановського, 3, м. Київ - 142, 03680, Україна, e-mail: stetsun777@yahoo.com*

Розрахована густина електронних станів аморфної плівки силіциду нікелю. Для цього використовувались формули, одержані на основі теорії Нобелівського Лауреата Н. Мотта та Е. Девіса. Встановлено, що електронні стани в вершині валентної зони даного матеріалу обумовлені d - електронами нікелю, p - електронами кремнію та s - електронами нікелю.

**Ключові слова:** електронні стани, тонка плівка.

*Стаття постуила до редакції 20.02.2013; прийнята до друку 15.06.2013.*

Силіцид нікелю належить до важливих силіцидів, які знаходять застосування в електроніці. Силіцид нікелю використовується в технології виробництва процесорів сучасних комп'ютерів [1, 2]. З силіциду нікелю виготовляють транзистори.

Відомо, що плівка силіциду нікелю осаджена на не нагріту підкладку є аморфною. Це зумовлює актуальність дослідження властивостей силіциду нікелю в аморфному стані.

В даній роботі досліджено густину електронних станів аморфної плівки силіциду нікелю. Можна без сумнівів стверджувати, що однією із найкращих фізичних теорій аморфного стану є теорія Нобелівського Лауреата Н. Мотта та Е. Девіса [3]. В цій теорії був одержаний вираз для оптичної провідності аморфних матеріалів:

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

де  $m$  – маса електрона,  $e$  – заряд електрона,  $E$  – енергія,  $N$  – густина електронних станів в валентній зоні чи в зоні провідності,  $\omega$  - частота світла,  $D$  – матричний елемент переходу,  $\Omega$  - об'єм зразка.

З оптики твердого тіла відомо, що оптична постійна  $\epsilon_2$  зв'язана з оптичною провідністю як:

$$e_2 = \frac{4ps}{w} \quad (2)$$

Тоді для спектральної залежності оптичної провідності одержуємо вираз:

$$e_2 = \frac{8p^4e^2\hbar^2a}{m^2w^2} \int N_v(E)N_c(E+\hbar w)dE \quad (3)$$

де  $N_v(E)$  – густина електронних станів в валентній зоні,  $N_c(E+\hbar\omega)$  – густина електронних станів в зоні

провідності. При цьому було враховано, що:

$$D = p \left( \frac{a}{\Omega} \right)^{1/2} \quad (4)$$

де  $a$  – середнє значення міжатомної відстані.

Для розрахунку густини електронних станів на основі спектральної залежності оптичної постійної  $\epsilon_2(\hbar\omega)$  необхідно врахувати певні особливості густини електронних станів аморфних матеріалів в зоні провідності. Для ряду аморфних матеріалів, таких як аморфний кремній, германій було встановлено, що густину електронних станів в зоні провідності можна апроксимувати константою [4]. Аналогічна ситуація була експериментально підтверджена для халькогенідних стекол [5]. Така специфічна особливість густини електронних цих матеріалів пояснюється їх аморфною структурою, коли внаслідок безпорядку, електрони розподіляються при незначному віддаленні від краю зони провідності практично однорідно. Тому будемо вважати, що в аморфному силіциду нікелю спостерігається аналогічний розподіл електронів по станам в зоні провідності.

Тоді в виразі (3) величину  $N_c(E+\hbar\omega)$  можна винести за знак інтеграла як константу. Потім, помноживши обидві частини цього виразу на  $(\hbar\omega)^2$  та продиференціювавши обидві частини по  $(\hbar\omega)$ , одержимо вираз для розрахунку густини електронних станів:

$$N_v(E_F - \hbar w) = \text{const} \frac{d}{d(\hbar w)} \left[ (\hbar w)^2 e_2(\hbar w) \right] \quad (5)$$

де  $E_F$  – енергія Фермі.

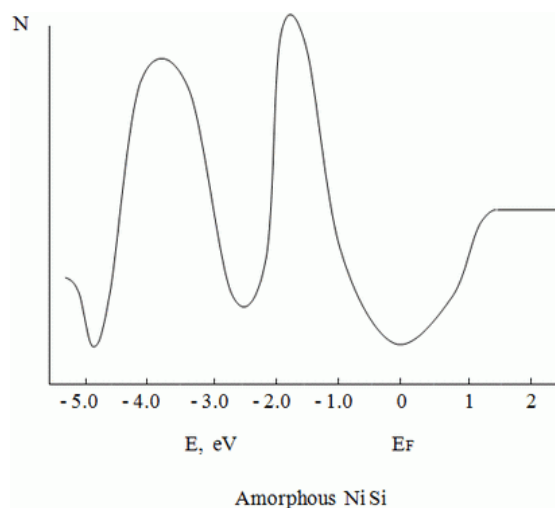
При виведенні проміжного виразу:

$$\frac{d}{d(\hbar\omega)} \int_{E_F - \hbar\omega}^{E_F} N_V(E) dE = N_V(E_F - \hbar\omega) \quad (6)$$

використовується відома із математичного аналізу теорема про диференціювання визначеного інтеграла:

$$\frac{d}{dx} \int_a^x f(t) dt = f(x) \quad (7)$$

Результати розрахунку густини електронних станів для аморфного NiSi приведені на рис. 1. При розрахунку використовувалась спектральна залежність оптичної постійної  $\epsilon_2(\hbar\omega)$  аморфної плівки NiSi досліджена в широкому спектральному інтервалі [6]. Нами виконувалось порівняння нашого розрахунку із результатами дослідження кристалічного матеріалу та дослідженням парціальних внесків в густину електронних станів силіцидів [7, 8]. Такий аналіз показує, що перший максимум – при 2 еВ у валентній зоні в основному обумовлений d-електронами нікелю та р-



**Рис. 1.** Густина електронних станів аморфної плівки NiSi. електронами кремнію, а другий максимум – при 4 еВ s-електронами нікелю та р-електронами кремнію.

- [1] R.E. dos Santos, I. Doi, J.A. Dizin et al., Revista Brasileira de Aplicacoes de Vacuo 23, 32.
- [2] A.M. Skvorcov, Minitjuarizacija pozavchera, vchera, segodnja i zavtra // <http://faculty.ifmo.ru/csd>.
- [3] N. Mott, Je. Djevis, Jelektronnye processy v nekristallicheskih veshhestvah (Mir, Moskva, 1982).
- [4] W. Paul, G. A.N. Connel and R.J. Temkin, Advances in Physics. 22, 531 (1973).
- [5] H. Hoshi, Y. Suzuki, M. Hirai, J. Non-Cryst. Solids. 95-96, 749 (1987).
- [6] S.I. Sidorenko, Ju.M. Makogon, S.M. Voloshko, Materialoznavstvo tonkoplivkovih nanostruktur. Difuzija i reakcii (Naukova Dumka, Kiiv, 2000).
- [7] Shigeto R. Nishitani, Shunsuke Fujii, Masaka Mizuno et. al., Phys. Rev. B. 58, 9741 (1998).
- [8] V. Bellani, G. Guizzetti, F. Marabelli et al., Phys. Rev. B. 46(I), 9380 (1992).

А.І. Stetsun

## The Density of Electron States of Nickel Silicide Amorphous Film

Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of NASU,  
3 Krzhyzhanovsky Str., Kiev, 03680, Ukraine, e-mail: [stetsun777@yahoo.com](mailto:stetsun777@yahoo.com)

The density of electron states of amorphous nickel silicide has been calculated. With this object definite equations were got based on theory N. Mott and E. Davis. Electron states at the top of valence band are conditioned by d electron of nickel, p electron of silicon, s electron of nickel.