

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ ПЛОТНОСТИ ЭЛЕКТРОННЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ В НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНКАХ $\text{Bi}_2\text{Te}_3 - \text{Sb}_2\text{Te}_3$

С.Х. Шамирзаев\*, Д.А. Юсупова\*\*, Э.Д. Мухамедиев\*, К.Э. Онаркулов\*\*

\*Физико-технический институт АН РУз (Ташкент)

\*\*Ферганский государственный университет  
Узбекистан

Поступила в редакцию 15.05.2006

Использование временных рядов и регрессионного анализа, совместно с вычислением размерности вложения “временного ряда” позволило разработать методику определения эффективной плотности электронных поверхностных состояний (ЭПЭС) в нанокристаллических полупроводниковых пленках при наложении циклической деформации. “Временные ряды” составлены из деформационной зависимости активной и реактивной частей импеданса пленок теллуридов висмута-сурьмы, измеренных в широком частотном диапазоне. Измерены вариации активного сопротивления и емкости нанокристаллических пленок теллуридов висмута-сурьмы при наложении необратимой деформации. По этим вариациям определена ЭПЭС и найдена ее деформационная зависимость. Процедура определения электронных поверхностных состояний требует высокого уровня автоматизации проводимых измерений. Для каждой частоты, на которой определяется импеданс, требуется измерить более  $10^3$  значений активной и реактивной частей импеданса при наложении деформации.

### ВВЕДЕНИЕ

В последние годы возрастают масштабы использования нанокристаллических полупроводников, зерна которых имеют размеры порядка десятка нанометров. Это связано с многообразием их функциональных свойств. Специфической особенностью нанокристаллических полупроводников является наличие в них встроенных поверхностей раздела – межзеренных границ (МЗГ), которые оказывают определяющие влияния на электрофизические свойства нанокристаллов. В настоящее время физика нанокристаллических пленочных полупроводников находится в зачаточном состоянии. Поэтому исследование реакции этих объектов на наложенные физические поля будет способствовать созданию физики нанокристаллических полупроводников [1, 2].

### ТЕОРИЯ

Вся огромная разновидность межзеренных границ (МЗГ) в пленках из полупроводниковых смесей обычно моделируется одной МЗГ в эффективном бикристалле. Его параметры неизвестны. Их подменяют усред-

ненными свойствами исходных зерен, что приводит к неопределенности получаемых результатов. Это серьезный недостаток существующей ситуации в области полупроводниковых нанокристаллических пленок. Используемые модели являются одномерными. Электронная структура межзеренных границ весьма чувствительна к захвату примесей растущими пленками. Это способствует получению пленок с уникальными свойствами. На межзеренных границах находятся адсорбированные атомы, вакансии и другие дефекты.

В нанокристаллах имеется сильно развитая межзеренная поверхность. Так, например в тензочувствительных пленках теллуридов висмута-сурьмы средний линейный размер одной гранулы составляет 50 нм ( $5 \cdot 10^{-6}$  см). Для пленок  $\text{Bi}_2\text{Te}_3\text{-Sb}_2\text{Te}_3$ , геометрические размеры которых составляют  $1 \times 0,1 \times 0,0003$  см<sup>3</sup>, общая площадь меж-гранульной поверхности достигает 60 см<sup>2</sup>.

Поверхностные электронные состояния выполняют роль центров рекомбинации и захвата в зависимости от числа носителей, сечения захвата электрона ( $C_n$ ) и дырки ( $C_p$ ),

концентрации поверхностных состояний ( $N_{ss}$ ) их типа и энергетического положения ( $E_s$ ).

В этих условиях становится актуальной разработка методов и средств изучения роли эффективной плотности электронных поверхностных состояний нанокристаллических пленок непосредственно из анализа экспериментальных данных. Здесь также всю совокупность электрически активных межзеренных границ (МЗГ) в нанокристаллической пленке моделируют одной эффективной МЗГ.

Для нейтрального перехода свободными остаются два параметра: заряд поверхности раздела  $Q_i$  и приложенное напряжение  $U$ . В условиях  $U = 0$  заряд поверхности раздела определяется пространственно однородным уровнем Ферми  $F$ . Его можно вычислить интегрируя плотность состояний  $N_{ss}(E_i)$  на поверхности раздела:

$$Q_1 = q \int ds \int \{dE \cdot N_{ss}(E) \cdot f(E)\}, \quad (1)$$

где  $f(E) = \frac{1}{1 + \exp\{(E - F)/kT\}}$ , а  $F_i(U = 0) = F_0$  – уровень Ферми.

Предполагается, что до захвата зарядов на ловушки поверхность раздела электрически нейтральна, в противном случае необходимо из правой части вычесть постоянный заряд. Если взять дифференциал по уровню Ферми  $F$ , то из формулы (1), где  $S$  – эффективная площадь поверхности, получается:

$$dQ/dF = q \cdot S \cdot N_{ss}. \quad (2)$$

Изменение поверхностного заряда по отношению к уровню Ферми дает концентрацию поверхностных состояний  $N_{ss}$ . Изменение  $dQ_{ss}/dF$  получается из выражения  $\Delta Q_{ss}/\Delta F$  при  $\Delta F \rightarrow 0$ .

Таким образом, для определения эффективной плотности ПС необходимо найти как изменение уровня Ферми  $\Delta F$  так и изменение  $\Delta Q_{ss}$  плотности эффективного поверхностного заряда.

Уровень Ферми  $F$  также как и  $Q$  могут меняться при наложении внешних полей – температуры или деформации или при введении примесных атомов.

В [4] исследовалась ситуация, когда  $F$  и  $Q$  менялись за счет изменения температуры поликристаллической пленки CdTe.

Цель данной работы – рассмотреть изменение  $F$  и  $Q$  в пленках теллуридов висмута-сурьмы при наложении необратимой циклической деформации.

Изменение  $Q_{ss}$  связано с изменением эффективной емкости  $C(\epsilon_i)$ . Поверхностный заряд равен  $Q = CU$ . При воздействии внешних сил

$$\Delta Q_s = C \cdot \Delta U + U \cdot \Delta C. \quad (3)$$

Общие изменения заряда  $Q_s$  содержит также индуцированный заряд, обусловленный разными величинами электрического напряжения  $U_{11}$  при отсутствии ( $U_{11}(0)$ ) и наложении ( $U_{11}(\epsilon_i)$ ) деформации  $\epsilon_i$ . Значит

$$\Delta Q_{ss} = U \cdot \Delta C. \quad (4)$$

Зависимость сопротивления нанокристаллических пленок можно представить в виде:

$$R = A \exp\left(-\frac{F}{kT}\right), \quad (5)$$

здесь  $A$  – геометрический фактор.

При деформации нанокристаллических пленок меняются как  $A$ , так и  $F$ . Уровень Ферми в металлах не меняется. Другое дело гетерогенные полупроводниковые пленки. Для них более важно при деформации изменение удельной проводимости, чем изменение геометрического фактора  $A$ . Т.е. в нанокристаллических полупроводниках изменение уровня Ферми более существенно, чем изменение  $A$ . Поэтому при наложении деформации  $\epsilon_i$  формула (5) имеет вид

$$R(\epsilon_i) = A_0 (1 + \gamma_i \cdot \epsilon_i) \cdot \exp(-[F(\epsilon_i) - \delta_i \cdot \epsilon_i]/kT), \quad (6)$$

здесь:  $\delta_i \cdot \epsilon_i$  – эффективное изменение энергетического положения запрещенной зоны, а  $\gamma_i \cdot \epsilon_i$  – изменение геометрического фактора.

Формула (6) может быть записана в виде:

$$R(\epsilon_i) = A_0 \cdot \exp(-[F(\epsilon_i) - b_i \cdot \epsilon_i]/kT), \quad (7)$$

где  $b_i = \delta_i + \gamma_i$ .

Такая запись позволит найти изменение уровня Ферми  $F$  с деформацией. Мы использовали высокий уровень автоматизации процесса измерения сопротивления пленки до, и в процессе наложения циклической деформации. В результате имеем:

$$kT \cdot \ln[R(\epsilon_i)/R(\epsilon_{i-1})] = b_i \cdot (\epsilon_i - \epsilon_{i-1}) - \Delta F_i \quad (8)$$

здесь  $\Delta F_i = F(\epsilon_i) - F(\epsilon_{i-1})$ , причем,  $i = 1, 2, 3, \dots, N$ , где в пределах одного цикла  $N = 10^3$ .

Таким образом,

$$-\Delta F(\epsilon_i) + b_i(\epsilon_i - \epsilon_{i-1}) = kT \cdot \ln[R(\epsilon_i)/R(\epsilon_{i-1})].$$

Измеряя частотную зависимость сопротивления  $R(\omega, \epsilon_i)$  в  $n$  точках ( $n \ll N$ ) мы получим систему уравнений, используемых в методе линейной регрессии,  $n$  – ограниченное число точек, которое подбирается так, чтобы обеспечить совпадение экспериментальных данных с аппроксимационной формулой (7). Нами найдено  $n = 5$  при деформационном интервале между экспериментальными точками равном  $\epsilon_i - \epsilon_{i-1} = 10^{-6}$ . Это позволяет в пределах любых пяти, следующих одна за другой точек, считать  $\Delta F(\epsilon_i)$  и  $b_i(\epsilon_i)$  не зависящими от деформации. Вне данного интервала  $\Delta F(\epsilon_i)$  и  $b_i(\epsilon_i)$  зависят от деформации.

Проведем расчет эффективной плотности поверхностных состояний  $N_{ss}$  для различных величин наложенной деформации –  $\epsilon_i$ . Как выше отмечалось, для определения эффективной плотности поверхностных состояний необходимо найти как изменение уровня Ферми  $\Delta F(\epsilon_i)$ , так и изменение  $\Delta Q_{ss}(\epsilon_i)$  плотности эффективного поверхностного заряда:

$$N_{ss} = U \cdot \Delta C(\epsilon_i) / \Delta F_i(\epsilon_i).$$

### ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

На Рис. 1 и Рис. 2 приведены зависимости сопротивления  $R(\epsilon_i)$  и емкости  $C(\epsilon_i)$  образцов нанокристаллических пленок теллурида висмута-сурьмы, от наложенной деформации (1/4 цикла – только растяжение в одну сторону) измеренные для области низких частот ( $f = 300 - 1000$  Гц).

Те же зависимости для частоты  $f = 240$  кГц, приведены на Рис. 3 и Рис. 4, где в отличие от Рис. 1 и Рис. 2 сопротивление и емкость образцов измерялись для одного полного цикла симметричной нагрузки (растяжение – от нуля до  $\epsilon_{max}$  и затем от  $\epsilon_{max}$  до нуля и обратно в область сжатия).

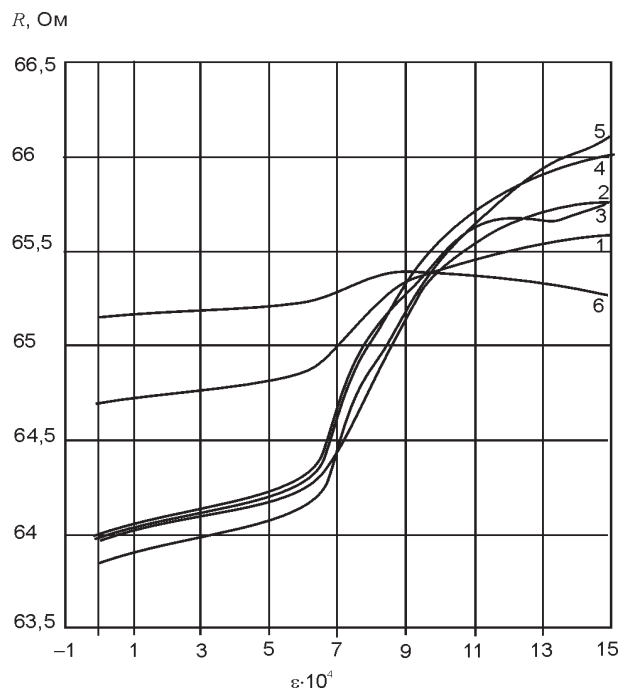


Рис. 1. Зависимость сопротивления образцов нанокристаллических пленок теллурида висмута-сурьмы от наложенной деформации  $R(\epsilon)$  (1/4 цикла – только растяжение в одну сторону), измеренные для области низких частот ( $f = 300 - 1000$  Гц): 1 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 300$  Гц; 2 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 400$  Гц; 3 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 500$  Гц; 4 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 800$  Гц; 5 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 900$  Гц; 6 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 1000$  Гц.

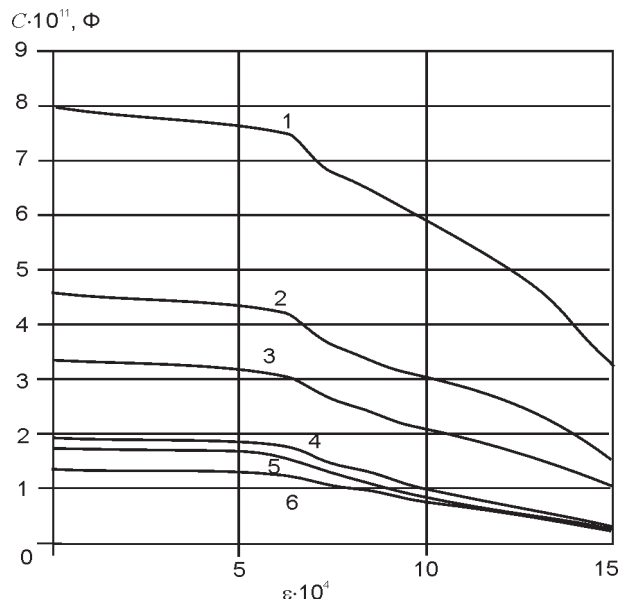


Рис. 2. Зависимость емкости образцов нанокристаллических пленок теллурида висмута-сурьмы от наложенной деформации  $C(\epsilon)$  (1/4 цикла – только растяжение в одну сторону), измеренные для области низких частот ( $f = 300 - 1000$  Гц): 1 –  $C = C(\epsilon)$  при  $f = 300$  Гц; 2 –  $C = C(\epsilon)$  при  $f = 400$  Гц; 3 –  $C = C(\epsilon)$  при  $f = 500$  Гц; 4 –  $C = C(\epsilon)$  при  $f = 800$  Гц; 5 –  $C = C(\epsilon)$  при  $f = 900$  Гц; 6 –  $C = C(\epsilon)$  при  $f = 1000$  Гц.

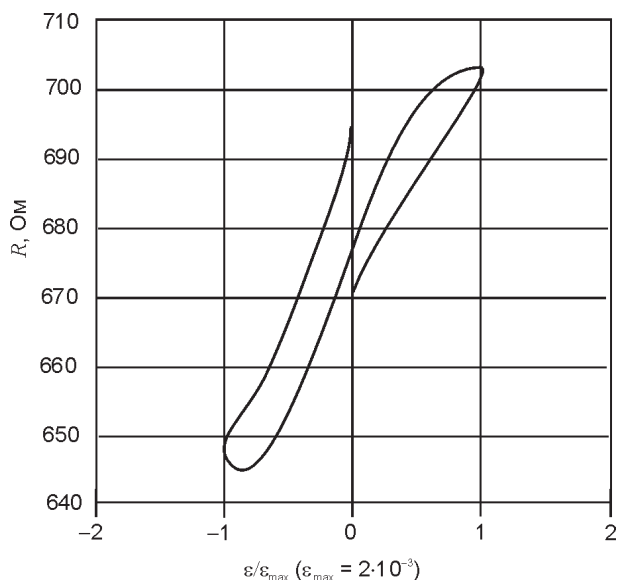


Рис. 3. Зависимость сопротивления образцов нанокристаллических пленок теллурида висмута-сурьмы от наложенной деформации  $R(\epsilon)$ , измеренная для одного полного цикла симметричной нагрузки (растяжение – от нуля до  $\epsilon_{\max}$  и затем от  $\epsilon_{\max}$  до нуля и обратно в область сжатия) при частоте  $f = 240$  кГц.

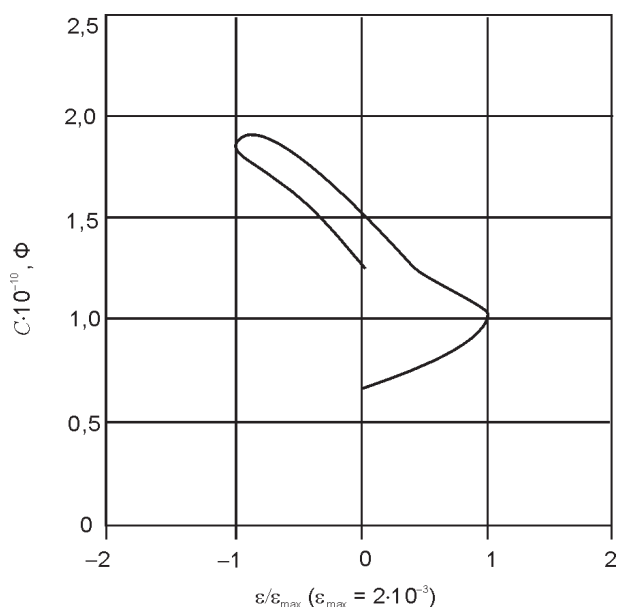


Рис. 4. Зависимость емкости образцов нанокристаллических пленок теллурида висмута-сурьмы от наложенной деформации  $C(\epsilon)$ , измеренная для одного полного цикла симметричной нагрузки (растяжение – от нуля до  $\epsilon_{\max}$  и затем от  $\epsilon_{\max}$  до нуля и обратно в область сжатия) при частоте  $f = 240$  кГц.

На Рис. 5 и Рис. 6 приведены зависимости эффективной плотности электронных поверхностных состояний  $N_{ss}(\epsilon_i)$  от наложенной деформации.

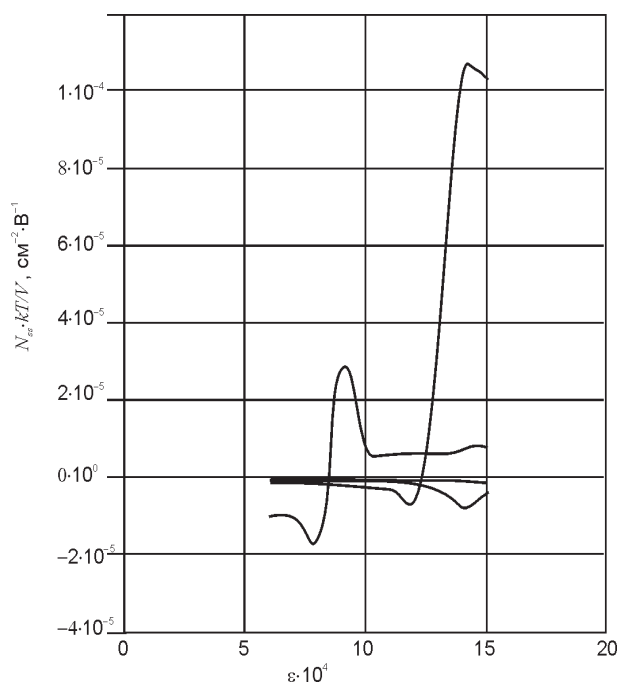


Рис. 5. Зависимость эффективной плотности электронных поверхностных состояний от наложенной деформации  $N_{ss}(\epsilon_i)$ , вычисленных для области низких частот ( $f = 300 - 900$  Гц): 1 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 300$  Гц; 2 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 500$  Гц; 3 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 800$  Гц; 4 –  $R = R(\epsilon)$  при  $f = 900$  Гц.

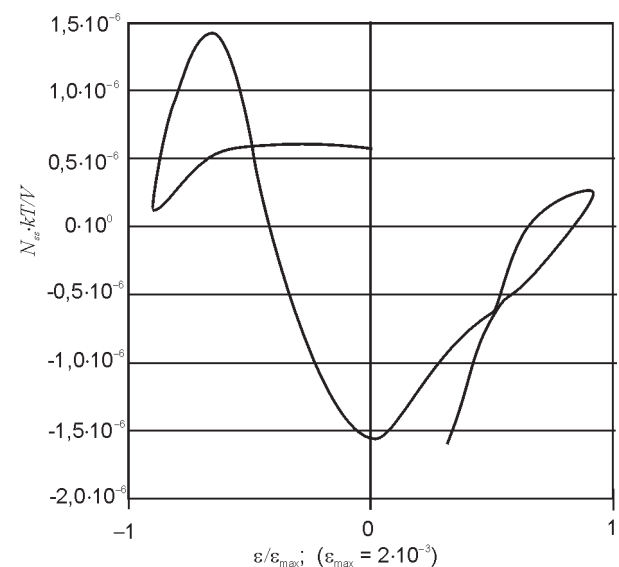


Рис. 6. Зависимость эффективной плотности электронных поверхностных состояний от наложенной деформации  $N_{ss}(\epsilon_i)$ , вычисленных для частоты  $f = 240$  кГц.

Из рис. 6 можно судить о необратимости гетерогенных структур при деформации, т.е. электронная структура нанокристаллической полупроводниковой пленки сильно изменяются при наложении циклической деформации.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Shamirzaev S. Modelling a fatigue imperfection of structural materials//International Journal of Fatigue. – 2002. – № 24. – P. 777-782.
2. Shamirzaev S. The theory of output parameters of a pressing powder mixture with random packing density//Solid State Sciences. – 2004. – № 6. – P. 1125-1129.
3. Полукристаллические полупроводники. Физ. свойства и применение/Под. ред. Г. Харбеке.– М.: Мир, 1989. –222 с.
4. Мирсагатов Ш.А., Шамирзаев С.Х. и др. Эффективные межзеренные поверхностные состояния в поликристаллических пленках//Теллотехника. – 1993. – № 3.
5. Shamirzaev S., Mukhamediev E. and Shamirzaeva G. Molecular-kinetic processes of fatigue of aluminum alloys// Proceedings of the Third International Conference on Very High Cycle Fatigue (VHCF-3). (Ritsumeikan University, Kusatsu). – 2004. – P. 108-115.

**ВИЗНАЧЕННЯ ЕФЕКТИВНОЇ ЩІЛЬНОСТІ ЕЛЕКТРОННИХ ПОВЕРХНЕВИХ СТАНІВ У НАНОКРИСТАЛІЧНИХ ПЛІВКАХ  $\text{Bi}_2\text{Te}_3 - \text{Sb}_2\text{Te}_3$  С.Х. Шамірзаєв, Д.А. Юсупова, Э.Д. Мухамедієв, К.Э. Онаркулов**

Використання часових рядів і регресивного аналізу, разом з обчисленням розмірності вкладення “часового ряду” дозволило розробити методику визначення ефективної щільності електронних поверхневих станів (ЕЩЕПС) у нанокристалічних напівпровідникових плівках при накладенні циклічної деформації. “Часові ряди” складені з деформаційної залежності активної і реактивної частин імпедансу плівок телуридів вісмуту-сурми, виміряних у широкому частотному діапазоні. Виміряно варіації активного опору і ємності нанокристалічних плівок телуридів вісмуту-сурми при накладенні необоротної деформації. За цими варіаціями визначена ЕЩЕПС і знайдена її деформаційна залежність. Процедура визначення електронних поверхневих станів вимагає високого рівня автоматизації проведених вимірів. Для кожної частоти на якій визначається імпеданс, потрібно вимірити понад  $10^3$  значень активної і реактивної частин імпедансу при накладенні деформації.

**DEFINITION OF EFFECTIVE DENSITY OF ELECTRONIC SURFACE STATE IN NANOCRYSTAL FILMS  $\text{Bi}_2\text{Te}_3 - \text{Sb}_2\text{Te}_3$  S.H. Shamirzaev, D.A. Yusupova, E.D. Mukhamediev, K.E. Onarkulov**

Use of temporary lines and perreccionno of the analysis, together with calculation of dimension of an investment “of a temporary line” has allowed to develop a technique of definition of effective density of electronic superficial condition (EDESC) in nanocrystal of semiconductor films at imposing cyclic deformation. “Temporary lines” are made from deformation of dependence of active and jet parts of an impedance films tellurid of vismut-antimony measured in a wide frequency range. The variations of active resistance and capacities nanocrystal films tellurid of vismut-antimony are measured at imposing irreversible deformation. On these variations is determined (EDESC) and is found her deformation dependence. The procedure of definition of electronic superficial condition requires a high level of automation of spent measurements. For each frequency on which the impedance is defined, it is required to measure more than  $10^3$  meanings of active and jet parts of an impedance at imposing deformation.