

ИССЛЕДОВАНИЕ ХАЛЬКОГЕНИДНЫХ АМОРФНЫХ ПЛЕНОК

Белозерцева В.И., Дьяконенко Н.Л., Корж И.А., Лыках В.А.,
Синельник А.В.*Национальный технический университет
«Харьковский политехнический институт», г. Харьков*

В результате экспериментальных исследований по осаждению халькогенидных пленок $A^I\text{BiC}^{\text{VI}}$ ($A^I - \text{Li, K, Na, Rb}$; $\text{C}^{\text{VI}} - \text{S, Se}$) на относительно холодную подложку (300 К) было установлено, что получающиеся пленки имеют аморфную структуру. Аморфные слои имеют не атомно-гладкую поверхность, а состоят из кластеров размером от 5 до 15 нм. Кластеры не контактируют между собой, а имеют некоторую граничную область с меньшей атомной плотностью, чем внутри кластеров. Образование такой структуры обусловлено низкой температурой подложки, вследствие чего процессы упорядочения атомов не могут быть активизированы.

В данной работе для объяснения причин образования кластеров был выполнен теоретический анализ аморфной структуры; были выбраны два параметра порядка: среднее отклонение угла ковалентной связи от оптимального значения ϕ и среднее межатомное расстояние r .

Существует множество описаний межатомного взаимодействия: потенциал Морзе, модельный потенциал Ван дер Ваальса, потенциал Ленарда-Джонса. Параметр ϕ совместно с применением эллиптических функций, дает хорошее описание разориентации остронаправленных ковалентных связей, а также их

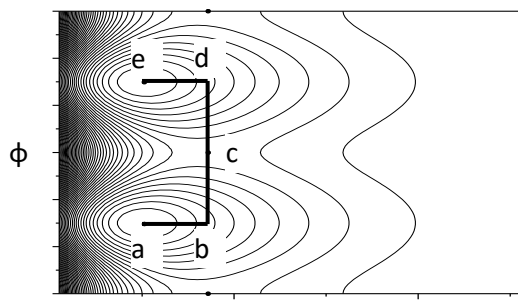


Рис. 1

периодичность. Вариация свободной энергии по параметрам порядка приводит к системе двух уравнений Лагранжа. Разделение переменных в данных уравнениях является нетривиальной задачей, поэтому был выбран прямоугольный путь, состоящий из трех прямых отрезков, как видно из рис.1. Путь проходит между двумя минимумами потенциала (а, е) и через седловую точку (с). На отрезках а-б и d-е изменяется только межатомное расстояние при постоянном угле разориентировки. На отрезке b-c-d изменяется угол при постоянном межатомном расстоянии. Применение

указанной процедуры разделения переменных позволяет найти пространственную зависимость параметров разупорядочения r и ϕ при переходе из одного кластера в другой.

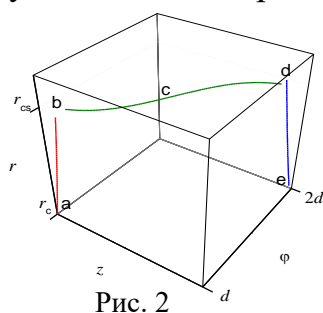


Рис. 2

пространственную зависимость параметров разупорядочения r и ϕ при переходе из одного кластера в другой.

На рис. 2 приведены результаты расчета параметров r , ϕ в зависимости от пространственной координаты z . Кластеры вносят отрицательный вклад в энергию изначально сильно неупорядоченной системы. Получены уравнения для границ кластеров и показано, что границы кластера содержат повышенное количество неупорядоченных связей.