

УДК 004.942

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ОСОБЕННОСТЕЙ И ЭЛЕКТРОПРОВОДИМОСТИ НАНОКЛАСТЕРНЫХ ОБРАЗЦОВ ТЕЛЛУРИДА СВИНЦА КАК ПЕРСПЕКТИВНЫХ МАТЕРИАЛОВ ЭЛЕКТРОНИКИ

Бухаров Д.Н., молодой ученый

Научный руководитель: Аракелян С.М., д.ф-м.н., профессор
Владимирский государственный университет им. А. Г. и Н. Г. Столетовых
ВлГУ
г. Владимир

Материалы на основе теллурида свинца зарекомендовали себя как перспективная элементная база для приборов оптики и электроники, например, как фотодетекторы или термоэлектрические элементы. В среднем для теллурида свинца и родственных растворов при высоких температурах (700-800 К) термоэлектрическая эффективность достигает значений 70%. Причем она может быть улучшена, например, за счет легирования. Так, в образцах с высоким уровнем акцепторного легирования уже при комнатной температуре наблюдается 2,5 кратное увеличение электропроводимости, а при высоких температурах оно достигает почти порядка величины [1]. Другим методом, позволяющим улучшить электропроводимость является наноструктурирование поверхности образцов тонкой пленки [2].

Исследуемые в работе образцы нанокластерных структур теллурида свинца были сформированы после лазерного воздействия на тонкие эпитаксиальные пленки теллурида свинца, полученные методом МЛЭ на кремниевой подложке с 2 нм слоем фторида кальция. В качестве источника излучения использовался 1,06 мкм YAG:Nd³⁺ – лазер с гауссовым профилем пучка диаметром от 30 до 100 мкм и мощностью от 7 до 10 Вт, двигавшемся со скоростью от 40 до 160 мкм/с [3]. По разработанной схеме (рис.1) были получены образцы систем нанокластеров теллурида свинца с латеральными размерами отдельных кластеров от 1 до 3 мкм с высотами до 70 нм (рис. 2).

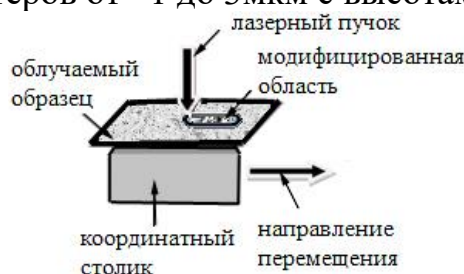


Рис. 1. Схема формирования системы нанокластеров теллурида свинца

Исследование АСМ-изображений полученных образцов позволило оценить размеры отдельных элементов, а также возможность их классификации на основе сходства фрактальных размерностей, вычисленных по методу boxcounting [4], выполненному в среде MATLAB, со стандартными

фракталами, например, дендритами (рис. 2а) или перколяционной структурой (рис. 2б).

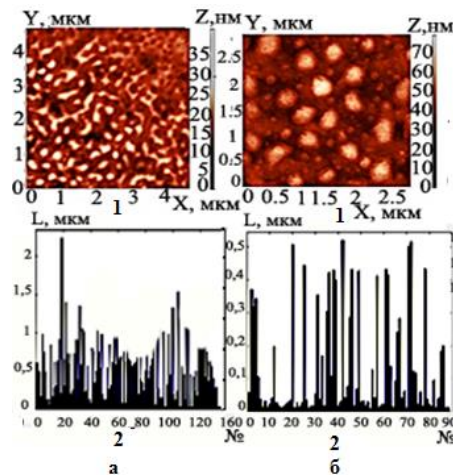


Рис. 2. АСМ-изображения нанокластерных образцов(сверху), распределение размеров нанокластеров(снизу):нанокластеры-дендриты размерами 30 нм – 2.23 мкм (а), система нанокластеров с перколяционной структурой размерами 9.08 нм – 0.52 мкм (б)

Электропроводимость полученных образцов исследовалась на основе резистометрии по 4-х точечной схеме [5] от 200 до 1000С. Полученная зависимость свидетельствовала о переключении проводимости при 850 С от туннельной к прыжковой (рис.3а). Также оценка вольт-амперных характеристик на отрезке напряжений [0.1 1]В для образца из рис. 1а показала свою температурную зависимость. Так, при комнатной температуре (250 С) для средних значений напряжений наблюдалось 50% увеличение силы тока по сравнению с неструктурированной поверхностью (рис3б). А дальнейшее увеличение температуры позволяло добиться увеличения силы тока на 1-2 порядка. Вольт-амперные характеристики показали прямо пропорциональную зависимость от плотности нанообъектов на поверхности образца, а значит от их топологии. Топология образцов формируется в зависимости от параметров лазерного излучения, а значит, может быть управляемой, поэтому электропроводимость может быть задана наперед.

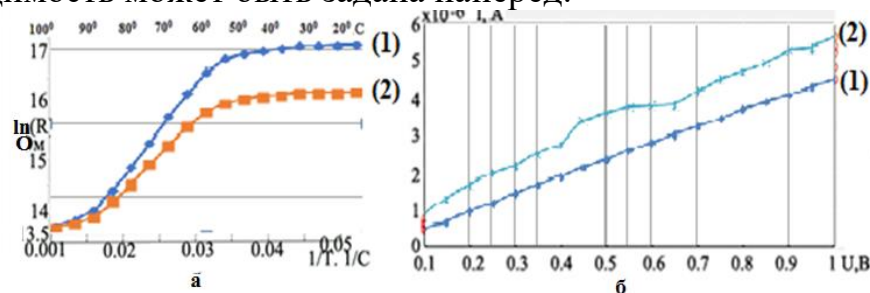


Рис.2. Исследование электропроводимости (1) – исходная структура, (2) – наноструктурированная из рис.1а: резистометрия (а), вольт-амперные характеристики (б)

В качестве модели структуры использовалось фрактальное приближение на основе диффузионно-ограниченной агрегации (DLA), позволяющее генерировать дендриты различной структуры (рис.4а). DLA была реализована

на основе клеточного автомата с окрестностью фон Неймана [6] (рис.4а – справа). Частицы, формировавшие дендрит двигались в расчетной области и прилипали к уже зафиксированным с заданной вероятностью прилипания, которая зависела от коэффициента диффузии была обратно пропорциональна температуре в системе [7] (рис.4а – слева). Модель электропроводности оценивалась через вольт-амперные характеристик в приближении закона Ома, для которого сопротивление дорожки проводимости определялась как сумма дорожек проводимости в кластерах и между ними (рис. 4б). В кластерах дорожка проводимости оценивалась по классической формуле, пропорциональное своей длине, определенной как кратчайшее расстояние между двумя выбранными точками на границе кластера на основе алгоритма волнового алгоритма Ли [8]. Дорожка проводимости между кластерами определялась по алгоритму Дейкстры как кратчайшее расстояние в сети сопротивлений Миллера-Абрахамса [9], на основе прыжкового приближения [10] в экспоненциальной форме.

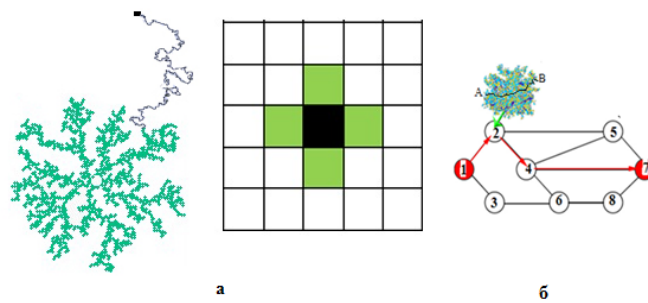


Рис.4. Схема модели: схема DLA модели структуры - слева, окрестность фон Неймана - справа (а), схема модели вольт-амперных характеристик: АВ – дорожка проводимости в нанокластере, 1-7 дорожка проводимости между нанокластерами(б)

На рис.5 приведена модель структуры (рис 5а) и вольт-амперных характеристик (рис.5б), для дендритного образца из рис. 2а. Сравнение фрактальных размерностей DLA модели и экспериментального образца выявило расхождение порядка 0.01, а соотношение вольт-амперных характеристик не превосходило величину 10 %. Такие величины свидетельствовали об адекватности предложенных моделей.

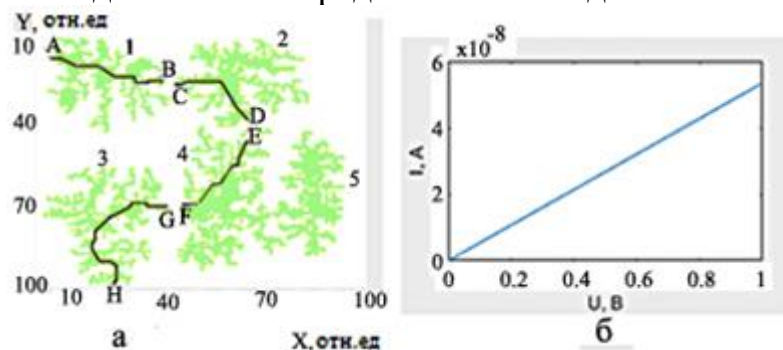


Рис 5. Результаты моделирования: модель структуры (а), модель вольт-амперных характеристик (б)

Приведенные оценки электропроводимости позволяют сделать вывод о перспективах применения наноструктурированных пленок теллурида свинца для разработки новой элементной базы термоэлектронных приборов, где необходимо эффективное преобразование тепловой энергии в электрическую, например, термодатчики, термогенераторы и т.д. [11] Предложенные методы синтеза позволяют получать образцы с требуемыми электрофизическими свойствами, а модели достаточно адекватно описывают их характеристики и могут быть полезны для калибровки экспериментального получения образцов.

Список литературы:

1. Дмитриев, А.В. Расчет термоэлектрических характеристик теллурида свинца при высоком уровне акцепторного легирования [Текст]/ А.В. Дмитриев // ВМУ. Серия 3. Физика. Астрономия. – 2018. – №6. – С. 95–98.
2. Аракелян, С.М. Введение в фемтонанопластику: фундаментальные основы и лазерные методы управляемого получения и диагностики наноструктурированных материалов: учеб. Пособие [Текст] / С.М. Аракелян, А.О. Кучерик, В.Г. Прокошев, В.Г. Рау, А.Г. Сергеев – М.: Логос, 2015. – 743 с.
3. Arakelian, S.M. Bimodal ensemble of nanoparticles on the surface of epitaxial lead telluride films under continuous laser radiation [Текст]/ Arakelian S.M., Bucharov D.N., Emel'yanov V.I., Zimin S.P., Kutrovskaya S.V., Kucherik A.O., Makarov A.A., Osipov A.V. //Journal of Surface Investigation. – 2015. – 9(6):1156. – PP. 1156-1163.
4. Gonzato, G. A practical implementation of the box counting algorithm [Текст]/ G. Gonzato //Computers & Geosciences. – 1998. –№ 24. – PP. 95-100.
5. Бурлаков, Р.Б. К вопросу об изменении удельного сопротивления проводящих слоев четырехзондовым методом [Текст]/ Р.Б. Бурлаков, В.С. Ковивчак // Вестн. Ом. ун-та. – 2014. – № 2. –С. 59-68.
6. Bukharov, D.N. Mathematical modeling of the structure and optical properties of the fractal island metal nanofilm [Текст]/ D.N. Bukharov, S.M. Arakelyan, A.O. Kucherik, O.A. Novikova, V.D. Samyshkin // Journal of Physics: Conference Series. . – 2020 – 1439. – 012050.
7. Бухаров, Д.Н. МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НАНОКЛАСТЕРОВ ТЕЛЛУРИДА СВИНЦА [Текст]/ Д.Н. Бухаров // Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование : материалы XX региональной научной конференции (Хабаровск, 3–7 октября 2022 г.). – Хабаровск : Изд-во ТОГУ, 2022. – 182 с.
8. Козадаев, А.С. Реализация волнового алгоритма для определения кратчайшего маршрута на плоскости при моделировании трасс с препятствиями /А.С. Козадаев, Е.В. Дубовицкий// Вестник ТГУ. – 2010. – т.15. – вып.6.
9. Почтенный, А. Е. Прыжковая проводимость на постоянном токе в собственных и примесных органических

полупроводниках: монография [Текст] / А. Е. Почтенный. – Минск : БГТУ, 2016. – 171 с.

10. Гантмахер В.Ф. Электроны в неупорядоченных средах [Текст] / В.Ф. Гантмахер. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2013. — 288 с.

11. Калмыков, Р. М. Разработка термоэлектрического материала теллурида свинца под воздействием ультразвука для термоэлектрогенераторов [Текст] / Р. М. Калмыков // Материалы Международного молодежного научного форума «ЛОМОНОСОВ-2018». — М.: МАКС Пресс, 2018.