

ЭЛЕКТРОННЫЙ ПЕРЕХОД ПОЛУПРОВОДНИК–МЕТАЛЛ И ОСОБЕННОСТИ ЭФФЕКТИВНОЙ ПРОВОДИМОСТИ ГЕТЕРОФАЗНЫХ СИСТЕМ FeSi–FeSi₂

© И. Н. Сачков, А. А. Повзнер

Уральский государственный технический университет,
620002 Екатеринбург, Россия
(Поступила в Редакцию 21 февраля 1996 г.)

Известно, что основным источником данных о критическом поведении электропроводности неупорядоченных систем является численный эксперимент (см., например, [1–3]). В проводившихся ранее исследованиях структура гетерофазного проводника аппроксимировалась сеткой сопротивлений. При использовании подобного подхода не исследовались критические явления в таких гетерогенных системах, в одной из фаз которых с изменением температуры происходит электронное фазовое превращение полупроводник–металл. До настоящего времени не выяснено, как влияет геометрия подобных пространственно неоднородных сред на характер аномалий температурно-концентрационных зависимостей удельной проводимости σ .

Для проведения численного эксперимента выбрана двухфазная система, содержащая полупроводник FeSi₂ (ширина запрещенной зоны $E_g = 0.2$ eV [4]) и FeSi, в котором происходит электронное превращение в металлическое состояние, сопровождающееся «захлопыванием» щели, вследствие расщепления состояний энергетических зон во флуктуирующих электронных полях [5,6]. Расчеты электронной проводимости отдельных фаз производились методом, описанным ранее в работе [5], с учетом данных зонных расчетов электронных спектров силицидов железа [7].

Далее рассматривались особенности протекания электрического тока в нескольких характерных двухфазных системах, характеризующихся двумерной геометрией. Подобные проводящие системы представляют собой либо тонкие пленки, либо трехмерные структуры, в которых картина тока является двумерной (плоской). В структуре *a*, изображенной на рис. 1, металлическая компонента FeSi образует тонкие слои, окружающие полупроводниковую фазу FeSi₂. Структура *b* дуальна *a*. Система *c* подобна рассмотренной в работе [3] и представляет собой квадратную сетку проводников, сопротивления которых принимают случайным образом два значения, характерные для полупроводниковой и металлической фаз. Система *d* содержит квадратные

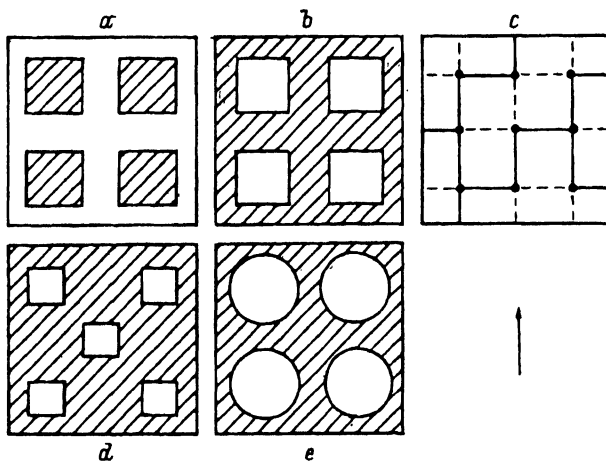


Рис. 1. Схемы рассматриваемых двухфазных систем полупроводник-металл. Заштрихованы области, занятые FeSi. Штриховые линии на сетке сопротивлений системы с — проводники FeSi₂. Стрелка — направление распространения потока.

включения FeSi₂, располагающиеся в шахматном порядке в матрице FeSi. В системе e полупроводниковая фаза формируется в виде круглых частиц, расположенных в металле. Будем обозначать далее проводимости матрицы и включений σ_i и σ_m соответственно.

Структура a может формироваться при напылении пленок или кристаллизации из расплава объемных образцов моносилцида железа, если исходный состав смещен от стехиометрии в область избытка кремния. При этом вторая фаза FeSi₂ выделяется по границам зерен FeSi. Подобным же образом структура b может реализоваться в образцах FeSi₂ при недостатке Si. Системы c и d представляют собой модели смесей силицидов при значительных отклонениях состава от стехиометрий.

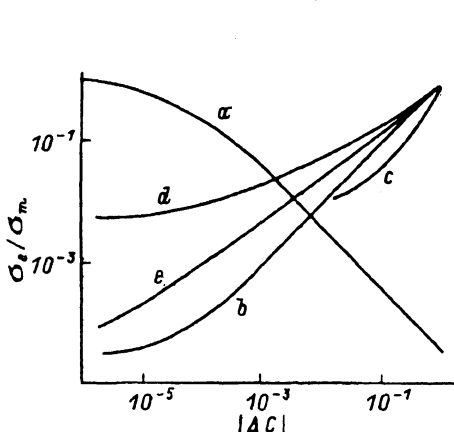


Рис. 2. Зависимости относительной эффективной проводимости систем a—e от абсолютной величины отклонения концентрации от ее критического значения.

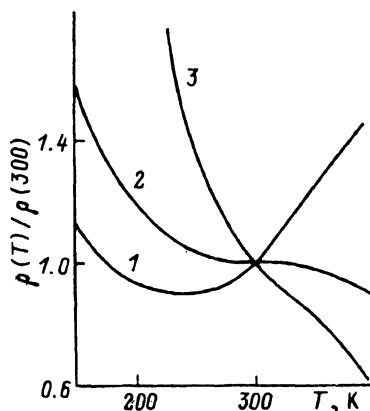


Рис. 3. Зависимости удельного сопротивления системы d от температуры при значениях ΔC , равных $0.5 \cdot 10^{-3}$ (1), $1.5 \cdot 10^{-3}$ (2) и $3 \cdot 10^{-3}$ (3).

Структура	C_c	t	ΔC_T	$\rho, \mu\Omega \cdot m$
<i>a</i>	0	1	$3.3 \cdot 10^{-4}$	16000
<i>b</i>	1	-1	$-2.9 \cdot 10^{-5}$	4.6
<i>c</i>	0.5	1.3	$1.5 \cdot 10^{-2}$	150
<i>d</i>	0.5	0.45	$1.5 \cdot 10^{-3}$	211
<i>e</i>	0.7854	0.71	$1.1 \cdot 10^{-4}$	5500

Следует отметить, что удельные проводимости обсуждаемых силицидов при 300 К равны 0.321 и $10^{-5} (\Omega \cdot m)^{-1}$, т.е. различаются на четыре порядка величины. Поэтому в структурах *a* и *b* ток распространяется практически одномерно, и эффективную проводимость σ_e нетрудно рассчитать с помощью известных формул Фойхта и Рейсса [8]. Для системы *c* σ_e устанавливалась с помощью выражения, полученного методом компьютерного эксперимента в работе [3],

$$\sigma_e = (0.5 - C)^{1.3} [1.7\sigma_m + \sigma_i(0.5 - C)^{-1.3}], \quad (1)$$

где C — концентрация полупроводниковой компоненты. Наибольшую сложность представлял анализ процессов электропереноса в структурах типа *d* и *e*. Для расчета эффективной проводимости данных систем использовался подход, предложенный в [9,10], основанный на вариационном принципе и методе конечных элементов. Пространственное распределение плотности тока при этом устанавливалось из условия экстремальности функционала

$$\chi = \int_{V_0} J^2 / \sigma dV, \quad (2)$$

где J и σ — локальные значения плотности тока и проводимости гетерогенной среды. Эффективная проводимость равна

$$\sigma_e = \langle J \rangle / \langle J / \sigma \rangle, \quad (3)$$

где \langle (угловые скобки) означают усреднение по объему образца V_0 .

На рис. 2 изображены зависимости проводимости σ_e от величины $\Delta C = |C_c - C|$, рассчитанные при $T = 300$ К. Здесь C — концентрация полупроводниковой фазы, равная доле площади двумерной системы, заполненной дисилицидом. Значения критической концентрации C_c , при которых происходит геометрическое смыкание частиц, приведены в таблице.

Из рис. 2 видно, что переход металл-полупроводник происходит в узком интервале концентраций. При этом оказалось, что в окрестности C_c зависимости эффективной проводимости обсуждаемых матричных регулярных структур от параметра ΔC можно описать так же,

как и зависимость $\sigma_e(\Delta C)$ статистических систем: $\sigma_e = \sigma_0 \Delta C^t$. Установленные нами значения критических индексов t представлены в таблице. Обращает на себя внимание наличие зависимости величин t от геометрии проводящих компонент системы. Кроме того, мы установили значения критической концентрации C_T , при которой существенно меняется температурная зависимость электропроводности гетерофазного резистивного материала и возникает состояние с нулевым температурным коэффициентом сопротивления. В таблице представлены величины параметра $\Delta C_T = C_c - C_T$ и соответствующие им значения удельного сопротивления $\rho = \sigma_e^{-1}$, а на рис. 3 изображены характерные зависимости $\rho(T)$.

Таким образом, видим, что геометрия обсуждавшихся выше гетерогенных структур оказывает существенное влияние на особенности температурных и концентрационных зависимостей их электропроводности.

Работа частично поддержана грантом конкурсного центра по фундаментальному естествознанию ГК РФ ВО (проект № 95-07.2-165).

Список литературы

- [1] Sc. Kirkpatrick. *Rew. Mod. Phys.* **45**, 4, 574 (1973).
- [2] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *УФН* **117**, 3, 401 (1975).
- [3] Б.Я. Балагуров, В.А. Кашин. *ЖЭТФ* **106**, 3, 811 (1994).
- [4] В.Н. Игишев, П.В. Гельд. *ФММ* **8**, 3, 463 (1959).
- [5] Н.В. Гельд, А.А. Повзнер, Л.Ф. Ромашева. *ДАН СССР* **313**, 5, 1107 (1990).
- [6] Z. Schlesinger, Z. Fizek, H.-T. Zhang. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 11, 1748 (1993).
- [7] Л.И. Винокурова, А.В. Власов, Э.Т. Кулаков *Тр. ИОФАН* **32**, 26 (1991).
- [8] Е.А. Митюшов, П.В. Гельд, Р.А. Адамеску. *Обобщенная проводимость и упругость макрооднородных гетерогенных материалов*. М. (1992). 145 с.
- [9] П.В. Гельд, И.Н. Сачков, А.Г. Гофман. *ДАН СССР* **315**, 3, 604 (1990).
- [10] И.Н. Сачков, Е.А. Митюшов. *Письма в ЖТФ* **22**, 1, 22 (1996).