

№ п/п	ОБРАБОТКА	Скорость охлаждения, град/сек	Характеристика образцов	Стеклообразующая способность
1	Отжиг больших зеркал телескопов	10^{-5}	Объемные	Хорошая
2	Отжиг оптических стекол	$\sim 2 \cdot 10^{-4}$	Объемные	Хорошая
3	Отжиг обычных стекол	$10^{-3} - 10^{-2}$	Объемные	Хорошая
4	Закаливание на воздухе	1 - 2	Объемные	Хорошая
5	Закаливание в воду	8 - 10	Объемные	Плохая
6	Закаливание в воду в тонкостенной (0,5 мм) ампуле	35	1 грамм вещества	Плохая
7	Закаливание в воду в тонкостенной (0,5 мм) ампуле	180	15 мг вещества	Очень плохая
8	Разбрызгивание расплава	$\sim 10^3$	Порошок	—
9	Спиннингирование	$10^5 - 10^6$	Лента толщиной десятки мкм	—
10	Распылительная закалка под действием ударной волны	$10^6 - 10^{10}$	Порошок	—

Рис. 1-1. Скорости охлаждения расплава, используемые в различных случаях

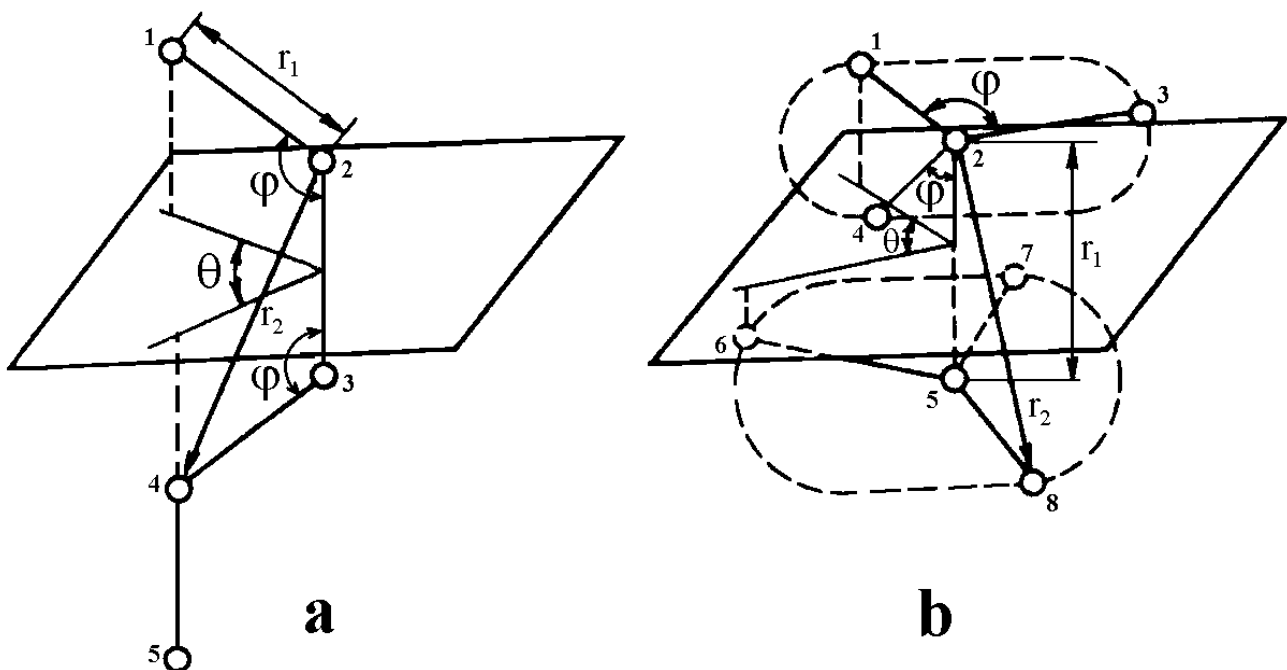


Рис. 1-2. Характеристики взаимного расположения атомов в случае линейной (а) и тетраэдрической (б) структуры.

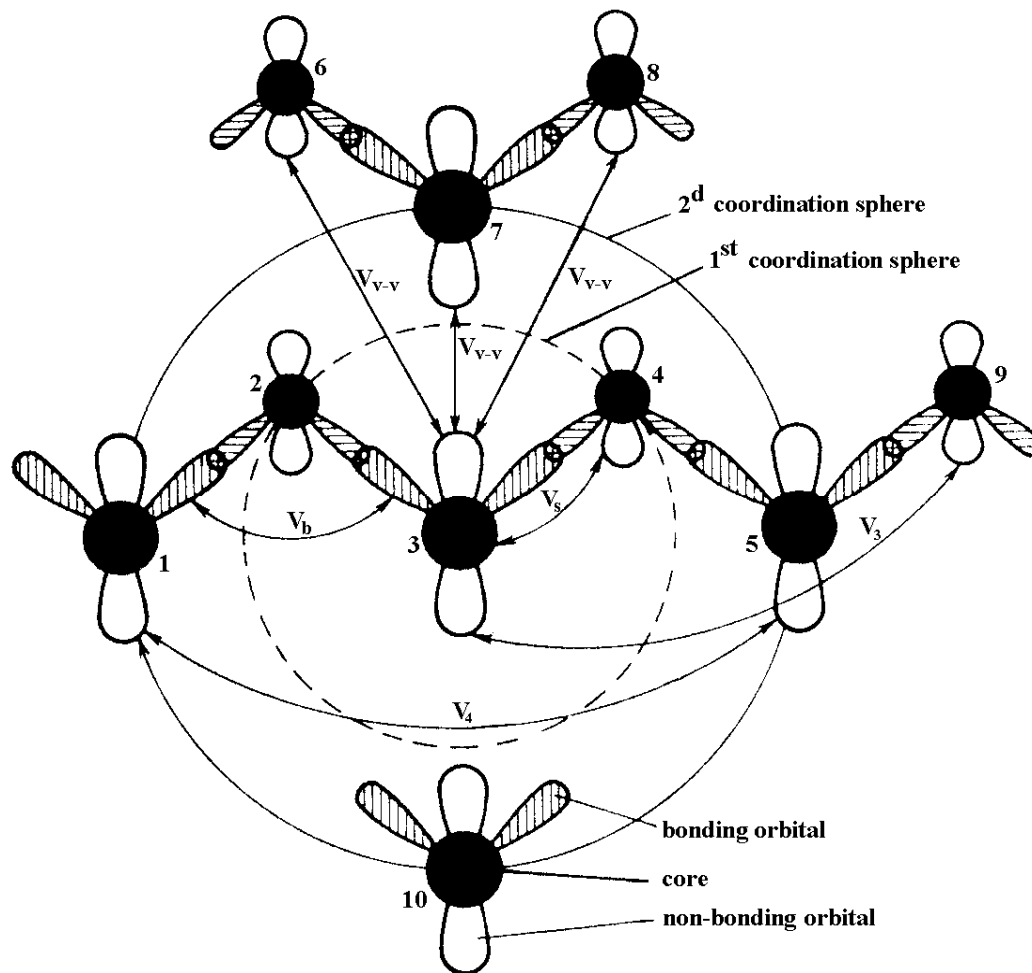


Рис. 1-3. Межатомные взаимодействия в линейном полимере.

$$I_3(S) = I(S) + \varphi(S) \quad (1) \quad \int I_3(S) S^2 dS = \int I_c(S) S^2 dS, \quad (3)$$

$$\frac{1}{j} \int I(S) S^2 dS = \int f^2(S) S^2 dS, \quad (2) \quad I_c(S) = \varphi(S) + j f^2(S), \quad (4)$$

$$i(S) = \frac{I_u(S) - f^2(S)}{f^2(S)} = \frac{1}{j} \left[\frac{I_3(S)}{f^2(S)} - \frac{I_c(S)}{f^2(S)} \right] = \frac{1}{j} i_1(S) \quad (5)$$

$$\int i(S) dS = 0 \quad (6); \quad \int i_1(S) dS = 0 \quad (6a) \quad j_{\min} > \text{MAX} \left\{ \frac{I_c(S)}{f^2(S)} - \frac{I_3(S)}{f^2(S)} \right\} \quad (9)$$

$$I_u(S) = f^2(S) \left[\frac{1}{j} i_1(S) + 1 \right] \quad (7) \quad j_{\max} < \text{MIN} \left\{ \frac{I_c(S)}{f^2(S)} \right\} \quad (10)$$

$$\varphi_u(S) = \frac{1}{j} \varphi(S) = f^2(S) \left[\frac{1}{j} \cdot \frac{I_c(S)}{f^2(S)} - 1 \right] \quad (8)$$

$$j_{cp} = \frac{j_{\max} + j_{\min}}{2} = \frac{1}{2} \left[\text{MAX} \left\{ \frac{I_c(S)}{f^2(S)} - \frac{I_3(S)}{f^2(S)} \right\} + \text{MIN} \left\{ \frac{I_c(S)}{f^2(S)} \right\} \right] \quad (11)$$

$$\int \frac{I_3(S)}{f^2(S)} dS = \int \frac{I_c(S)}{f^2(S)} dS \quad (12) \quad i_1(S) = \frac{I_3(S)}{f^2(S)} - \frac{I_c(S)}{f^2(S)} \quad (13)$$

$$\Phi PPA(r) = 4\pi r^2 \rho(r) = 4\pi r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_{S_1}^{S_2} S \cdot i(S) \cdot \sin(Sr) dS \quad (14)$$

Расчет нормированной интенсивности рассеивания электронов

S, Å	D, отн. ед.					t=2''		t=4''		t=8''		t=16''		t=32''		I ₃ ^{cp} , отн. ед.	f ²	I ₃ / f ²	I _c / f ²	i ₁	I _u
	2	4	8	16	32	t	1/1 ₀	t	1/1 ₀	t	1/1 ₀	t	1/1 ₀	t	1/1 ₀						
0.2																					
0.4																					
0.6																					
.....																					
5.8																					
6.0																					

Рис. 1-4. Расчет нормированной интенсивности рассеивания электронов.

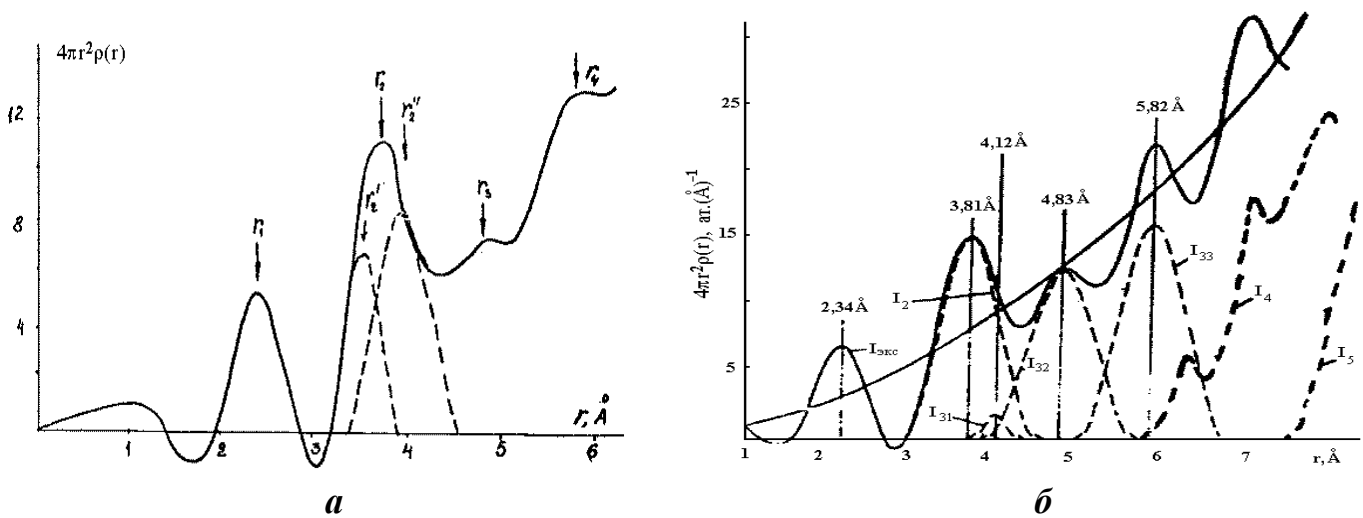


Рис. 1-5. Функции радиального распределения атомов некристаллических селена (а) и кремния (б).

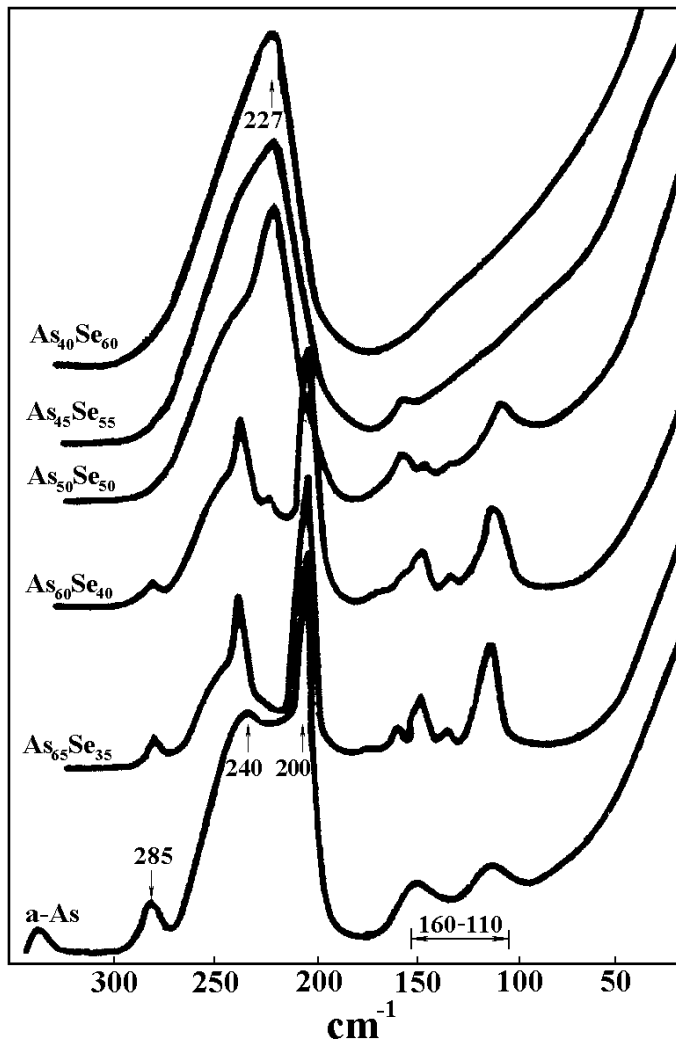


Рис. 1-6. Спектры комбинационного рассеяния стеклообразных материалов системы As-Se.

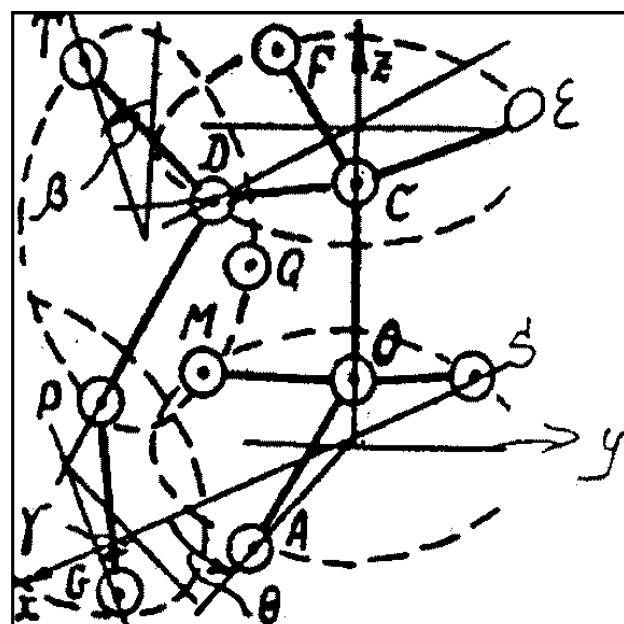
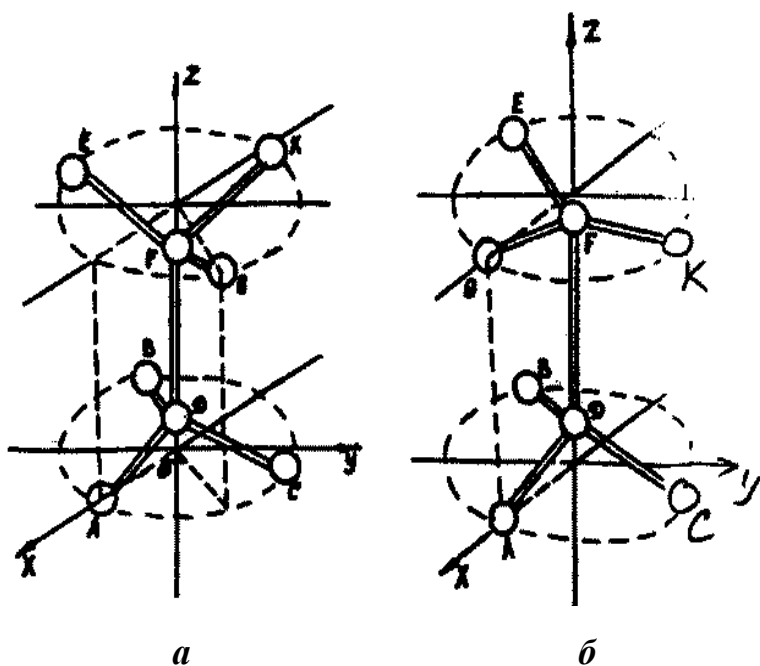


Рис. 1-7. Звездообразная (а) и затененная (б) конфигурации атомов кремния.

Рис. 1-8. Модель ячейки аморфного кремния.

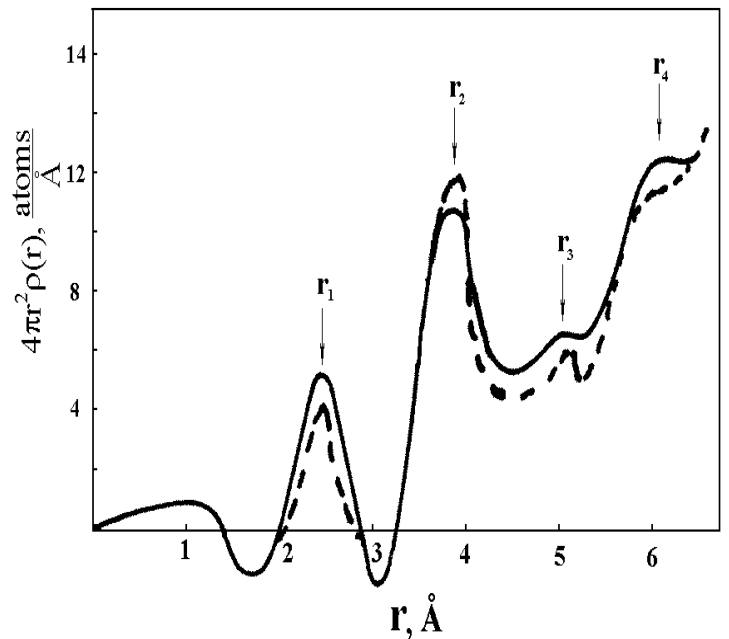
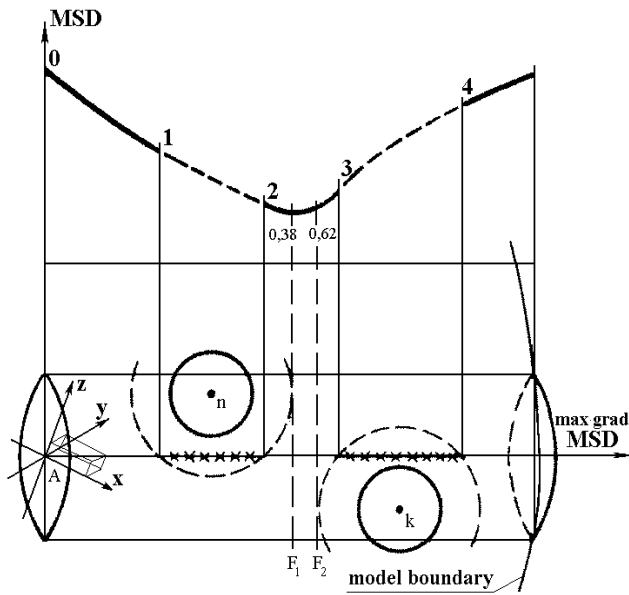


Рис.1-9. Нахождение положения атома, соответствующего минимуму СКО.

Рис.1-10. Экспериментальная ФРРА (—) и ФРРА модели (- - -) стеклообразного селена.

Энергия деформации ковалентных связей для тетраэдрических систем:

$$V = \frac{3\alpha}{16d_0^2} \sum_{ij} [(R_i - R_j)^2 - d_0^2]^2 + \frac{3\beta}{8d_0^2} \sum_{ijl} [(R_j - R_i)(R_l - R_i) - \frac{d_0^2}{3}]^2,$$

где: d_0 - ; i,j,l - ; $R_{i(j,l)}$ - ; α, β - .

Двухкоординированные системы:

Энергия деформации длин связей: $V_b = 0.5\alpha \sum (R_{ij}^2 - d_0^2)^2,$ (1)

где: $R_{ij} = |R_j - R_i|$ - ; d_0 - ; α - .

Энергия деформации угла связи: $V_a = 0.5\beta \sum_l [(R_{li} \cdot R_{lj}) - c]^2,$ (2)

где: $R_{li} = R_l - R_i, R_{lj} = R_l - R_j$ - ; c - ; β -

Энергия ван-дер-ваальсова взаимодействия: $V_{v-v} = \sum_i V_{li}$

$$V_{li} = \begin{cases} -\frac{A}{(R_{li})^6} + \frac{B}{(R_{li})^{12}}, & R_{li} \leq R_c \\ 0 & R_{li} > R_c \end{cases},$$
 (3)

где: A и B - ; $R_c \approx 4 \div 5 \text{ \AA}$ -

Энергия деформации двугранных углов: $V_d = \gamma \sum_l [(R_{ij} \cdot R_{jk})(R_{jk} \cdot R_{kl}) - K]^2,$ (4)

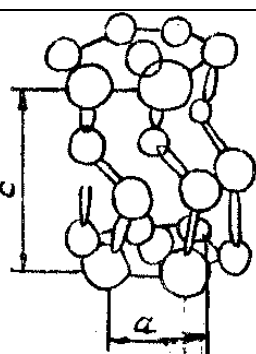
где: γ - ; i,j,k,l - ; K - ;

Рис.1-11. Энергия деформации ковалентных связей для тетраэдрических и линейных систем.

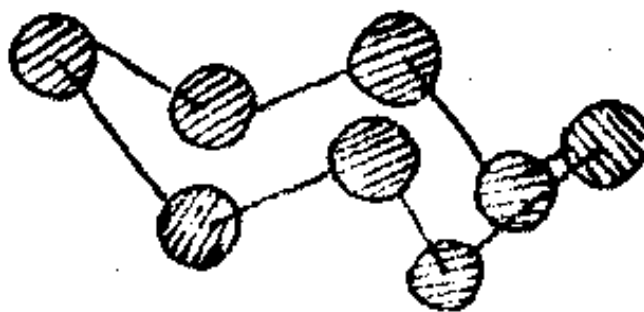
АЛЛОТРОПНЫЕ ФОРМЫ СЕЛЕНА

№	Аллотропные формы	Молекулярный состав
Кристаллические		
1	Тригональная	Параллельные спиралевидные цепи Se_n
2	α - моноклинная	Кольца Se_8
3	β - моноклинная	Кольца Se_8
4	Ромбоэдрическая	Кольца Se_6
Некристаллические		
1	Красная аморфная	Кольца Se_6
2	Черная аморфная	?
3	Стеклообразная	Цепи и/или кольца

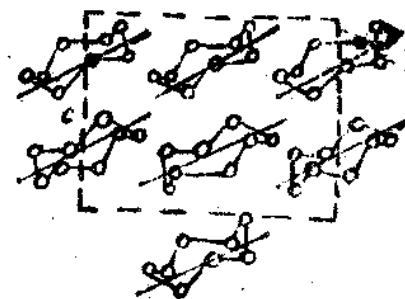
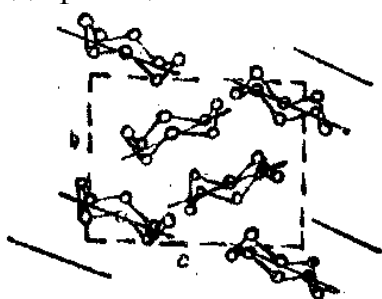
Рис.1-12. Аллотропные формы селена.



Элементарная ячейка тригональной модификации халькогена



Кольцевая молекула селена



Упаковка кольцевых молекул в кристаллическую решетку в случае α и β - моноклинного селена

Рис.1-13. Элементарные ячейки кристаллических модификаций селена.

Инфракрасное поглощение в диапазоне частот 50-300 cm^{-1}							Комбинационное рассеивание				
Стеклообразный селен	Положение, cm^{-1}	95	120	135	230	254	Сдвиг, cm^{-1}	110-115	140	~235	250-256
	характер	пик	плечо	пик	плечо	пик	характер	пик	плечо	плечо	пик
α - моноклинный селен	Положение, cm^{-1}	92-95	120	-	-	254	Сдвиг, cm^{-1}	113	-	-	250
	характер	дублет	пик	-	-	пик	характер	пик	-	-	пик
Тригональный селен	Положение, cm^{-1}	-	-	144	230	-	Сдвиг, cm^{-1}	-	143	237	-
	характер	-	-	пик	пик	-	характер	-	пик	пик	-

Рис.1-14. Результаты исследований селена методами колебательной спектроскопии.

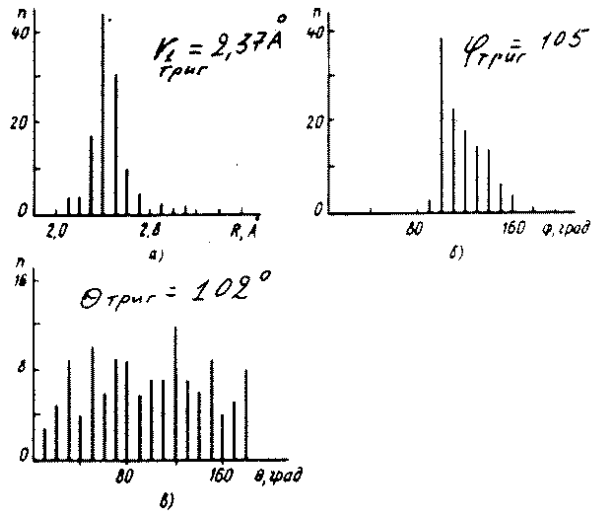


Рис.1-15. Распределение длин (а), углов (б) связей и двугранных углов (в) в модели некристаллического селена.

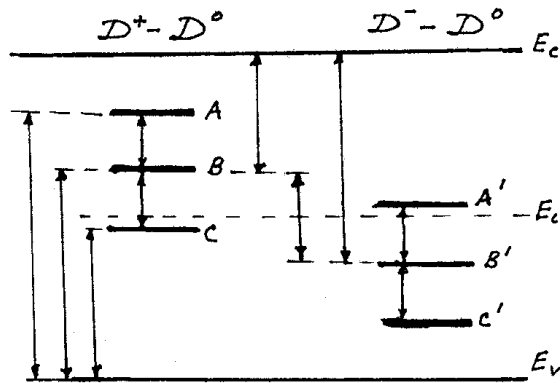


Рис. 1-16. Уровни локализованных состояний, соответствующие точечным дефектам в некристаллических полупроводниках.

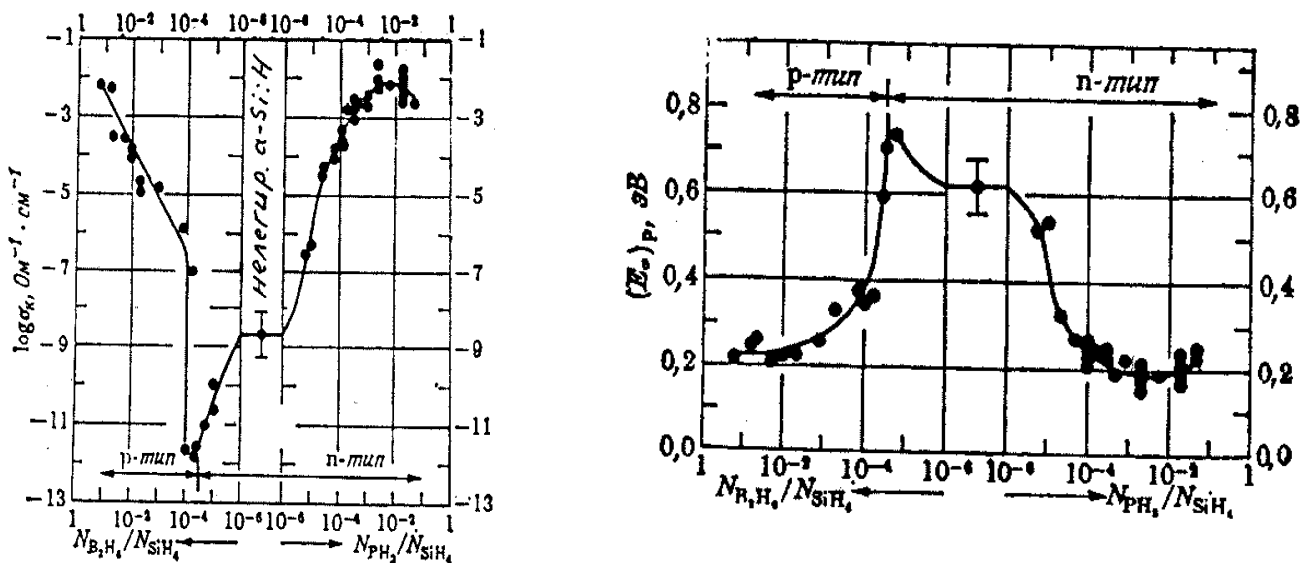


Рис.1-17. Зависимость электропроводности и ее энергии активации от уровня легирования α -Si:H.

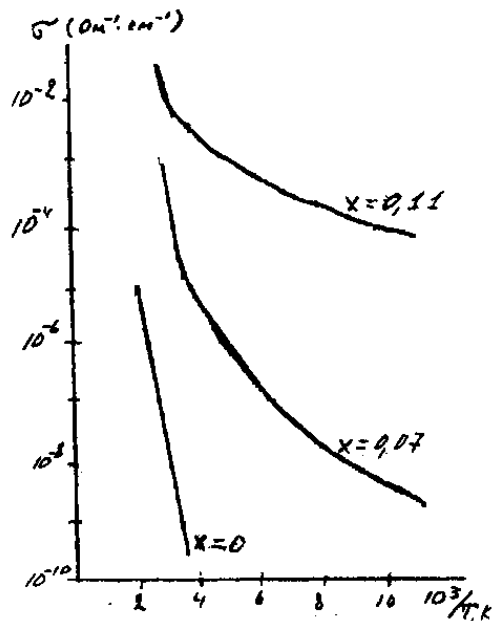


Рис. 1-18. Влияние химической модификации на температурную зависимость пленок ХСП.

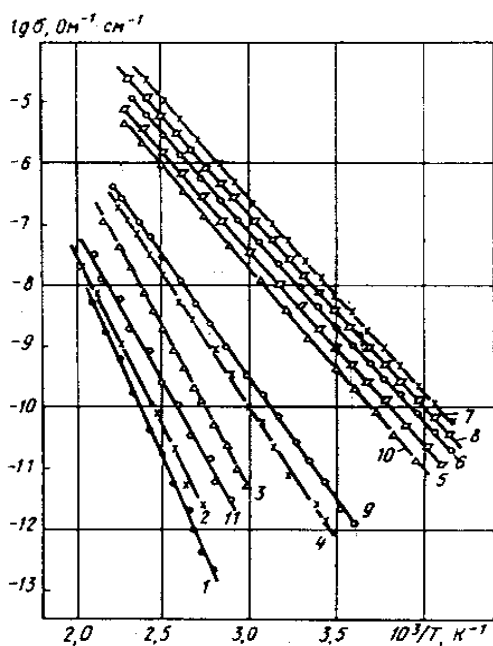


Рис. 5.26. Зависимость удельной электропроводности от температуры ХСП различных составов: 1 - $\text{GeSe}_{3,5}$; 2 - $(\text{GeSe}_{3,5})_{96}\text{Bi}_4$; 3 - $(\text{GeSe}_{3,5})_{94}\text{Bi}_6$; 4 - $(\text{GeSe}_{3,5})_{92}\text{Bi}_8$; 5 - $(\text{GeSe}_{3,5})_{90}\text{Bi}_{10}$; 6 - $(\text{GeSe}_{3,5})_{98}\text{Bi}_{12}$; 7 - $(\text{GeSe}_{3,5})_{86}\text{Bi}_{14}$; 8 - $(\text{GeSe}_3\text{Te}_{0,5})\text{Bi}_{10}$; 9 - $(\text{GeSe}_3\text{Te}_{0,5})_{96}\text{Sb}_4$; 10 - $\text{Si}_{15}\text{Se}_{79}\text{Bi}_{10}$; 11 - $(\text{GeSe}_{3,5})_{88}\text{Sb}_{12}$

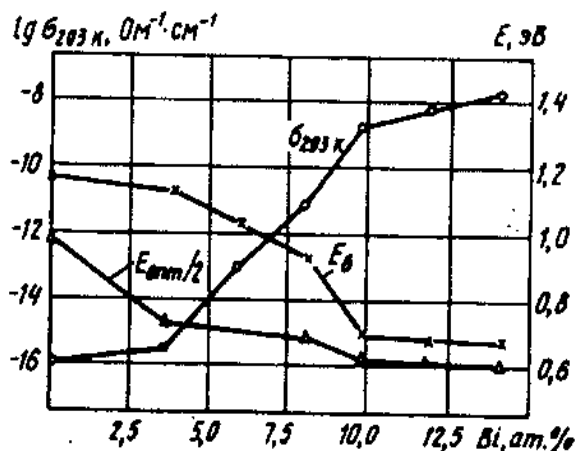


Рис. 5.27. Концентрационные зависимости удельной электропроводности ($\sigma_{293\text{K}}$) и энергии активации электропроводности ХСП системы $(\text{GeSe}_{3,5})_{100-x}\text{Bi}_x$

Рис.1-19. Влияние висмута на электрические характеристики ХСП.

Уровни структурной модификации

Уровень	изменения структуры	способ воздействия	характеристика чувствительных свойств	группы чувствительных свойств	примеры чувствительных свойств
1	Ближний порядок в расположении атомов	Различные методы и режимы получения	Все свойства	Все свойства	Все свойства
2	Средний порядок в расположении атомов	Воздействия в период или после изготовления внешними факторами	Свойства, связанные с перегруппировкой структурных единиц	Механические свойства, фазовые переходы	Вязкость, твердость, модуль Юнга, фотосжатие пленок, температура и энергия активации кристаллизации
3	Морфология	Изменения режимов получения и обработок	Свойства, зависящие от макрон неоднородностей	Электрические, оптические	Электропроводимость на переменном токе
4	Подсистема дефектов	Изменения режимов получения; обработки, воздействующие на подсистему дефектов	Свойства, зависящие от распределения плотности локализованных состояний и от положения уровня Ферми	Электрические, фотоэлектрические	Полевая зависимость электропроводности

Рис. 1-20. Уровни структурной модификации некристаллических полупроводников.

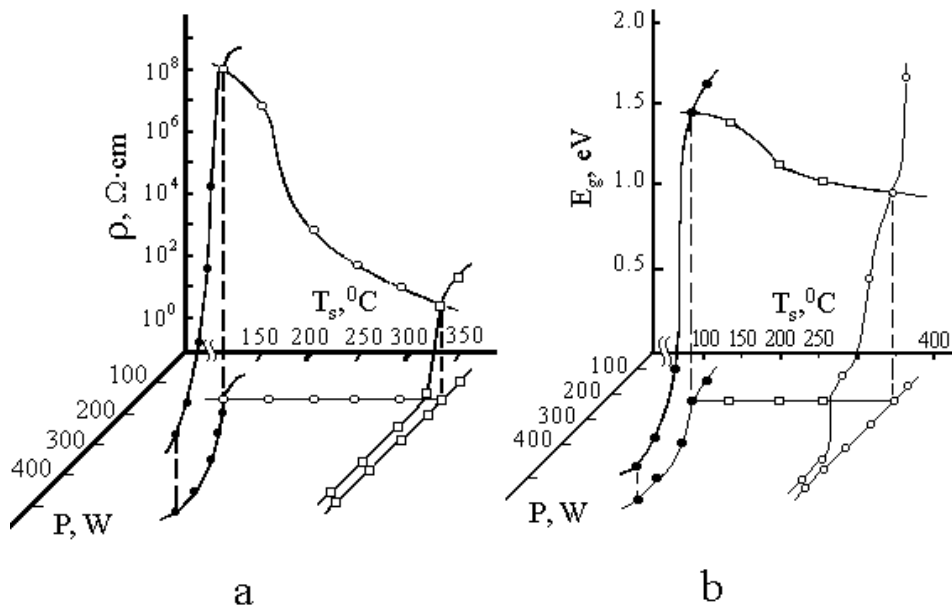


Рис.1-21. Зависимости удельного сопротивления (а) и ширины оптической щели (b) пленок *a-C:H* от режимов их изготовления (T_s – температура подложки, P – мощность высокочастотного разряда).

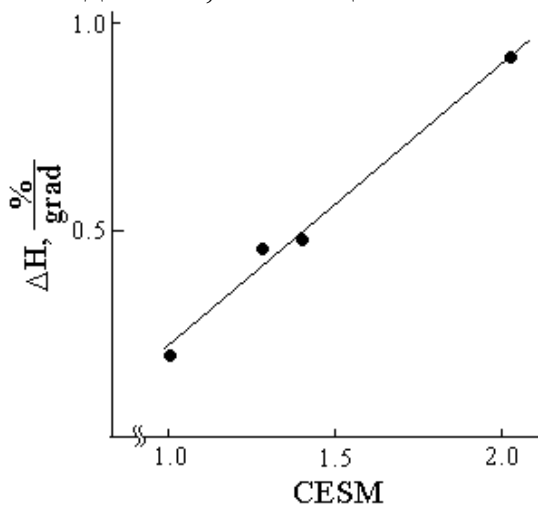


Рис.1-22. Зависимость величины изменения микротвердости халькогенидных стеклообразных полупроводников в результате изменения тепловой предыстории материала от величины критерия эффективности структурной модификации.

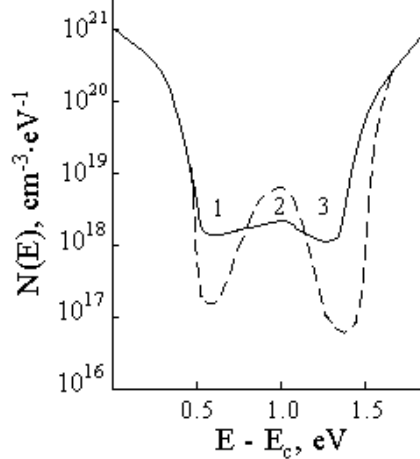


Рис.1-23. Распределение плотности локализованных состояний в щели подвижности *a-Si:H* до (сплошная линия) и после (пунктирная линия) обработки ультрафиолетовым излучением (доза 10^{19}cm^{-2}): 1 – по результатам метода постоянного фототока, 2 – по результатам моделирования температурной зависимости проводимости, 3 – по результатам анализа токов, ограниченных пространственным зарядом.

Уровень ближнего порядка

периоды	группы элементов					
	IV A	КЧ1	V A	КЧ1	VI A	КЧ1
2	6 <i>C</i> 12	2 3 4				
3	14 <i>Si</i> 28	2 3 4	15 <i>P</i> 31	3	16 <i>S</i> 32	2
4	32 <i>Ge</i> 72.5	4	33 <i>As</i> 75	3	34 <i>Se</i> 79	2 4 6
5			51 <i>Sb</i> 122	3	52 <i>Te</i> 128	2 3-расплав

(КЧ 1 – первое координационное число).

Рис.1-24. Структурная модификация на уровне ближнего порядка.

Уровни среднего порядка и морфологии

группы		системы $A_x^{IV} (A_x^V) B_{1-x}^{VI}$							группа
		значения x							
IV A	V A	0.60	0.50	0.40	0.33	0.25	0.20	0.11	VI A
Ge					GeSe ₂	GeSe ₃	GeSe ₄	GeSe ₈	Se
4					2.66	2.50	2.40	2.22	2
4					2.40	2.30	2.24	2.12	2
Ge			GeS	Ge ₂ S ₃	GeS ₂	GeS ₃	GeS ₄	GeS ₈	S
4			3.00	2.80	2.66	2.50	2.40	2.22	2
4			2.73	2.49	2.30	2.23	2.19	2.10	2
	As	As ₂ Se ₃	AsSe	As ₂ Se ₃	AsSe ₂	AsSe ₃	AsSe ₄	AsSe ₈	Se
	3	2.60	2.50	2.40	2.33	2.25	2.20	2.11	2
	3	2.53	2.42	2.31	2.25	2.19	2.16	2.09	2
	As	As ₃ S ₂	AsS	As ₂ S ₃	AsS ₂	AsS ₃	AsS ₄	AsS ₈	S
	3	2.60	2.50	2.40	2.33	2.25	2.20	2.11	2
	3	2.49	2.38	2.26	2.22	2.17	2.14	2.08	2

I - порог жесткости для чисто ковалентных связей;
II - порог жесткости с учетом ионности связей;
 2.25 - средняя координация атомов
 2.33 - $KЧ_1 \cdot (1 - I_c)$, где I_c - коэффициент ионности химических связей

Рис.1-25. Структурная модификация на уровнях среднего порядка и морфологии.

Уровень подсистемы дефектов

группы		Системы		группа
IV A	V A	$A_2^V B_3^{VI}$	$A^{VI} B^{VI}$	VI A
C				
Si	P			
Ge	As	As ₂ S ₃	S - Se	S
		As ₂ Se ₃	Se - Te	Se
		As ₂ Te ₃		Te

Рис.1-26. Структурная модификация на уровне подсистемы дефектов.

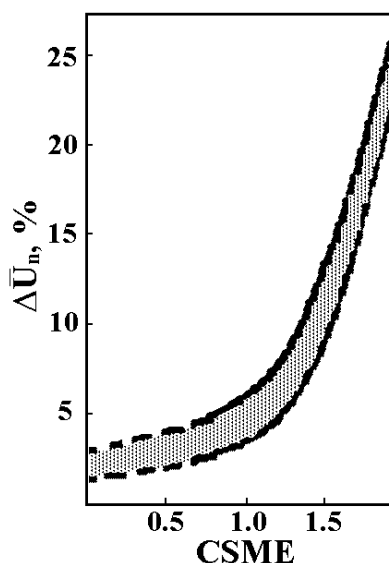
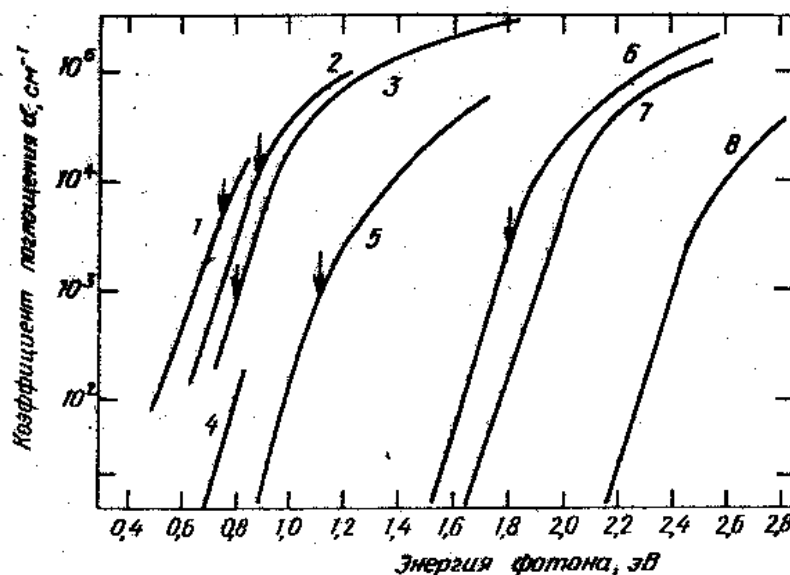


Рис.1-27. Зависимость величины статистического разброса порогового напряжения переключения от величины КЭСМ.



Экспоненциальная форма края поглощения в аморфных полупроводниках при комнатной температуре. Стрелками обозначены значения энергии $2E$ для материалов, в которых электропроводность удовлетворяет соотношению: $\sigma = C \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)$. Кривые 1-8 соответствуют следующим материалам:

1 – GeTe, 2 – Te, 3 – As₂Te₃, 4 – CdGeAs, 5 – Ge₁₆As₃₅Te₂₈S₂₁, 6 – As₂Se₃, 7 – Se, 8 – As₂S₃

Рис.1-28. Форма края оптического поглощения некристаллических полупроводников.

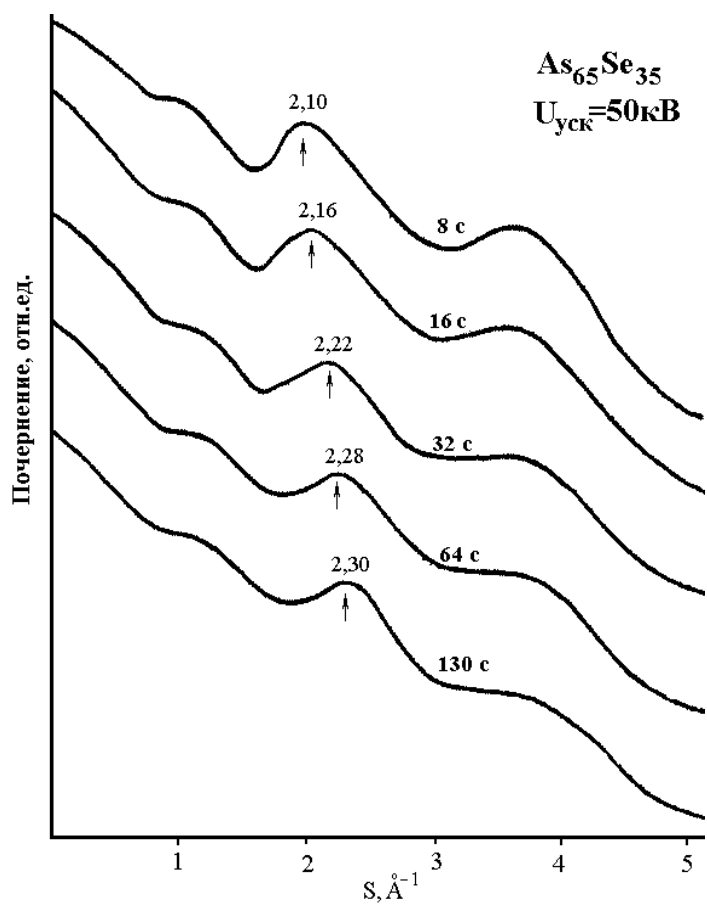


Рис.1-29. Влияние облучения электронами на результаты дифракционного эксперимента в случае ХСП.