

# ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ СИЛИЦИДА НИКЕЛЯ

А.И. Стецун

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича, ул. Кржижановского 3, Киев  
03680, Украина, электронная почта [stetsun777@yahoo.com](mailto:stetsun777@yahoo.com)

Силициды никеля применяются в электронике [1]. Расчет плотности электронных состояний этих материалов играет важную роль для интерпретации их электрических свойств. В настоящей работе рассчитана плотность электронных состояний аморфного NiSi. Расчет основывается на формулах из теории Н. Мотта и Э. Девиса для аморфных материалов [2]. Формула для спектральной зависимости оптической постоянной  $\epsilon_2(\hbar\omega)$  была получена на основе формулы для проводимости. Таким образом, было получено выражение, где оптическая постоянная прямо пропорциональна интегралу от произведения плотности электронных в валентной зоне и плотности электронных состояний в зоне проводимости. Для дальнейших расчетов важную роль играет тот факт, что для многих аморфных материалов, таких как аморфный кремний, аморфный германий, халькогенидные стекла и других материалов плотность электронных состояний в зоне проводимости успешно задается плоской вершиной, т. е. константой [3, 4]. Тогда такую константу можно вынести из под знака интеграла. Затем для того, чтобы получить зависимость плотности электронных состояний от энергии, было выполнено дифференцирование интеграла. Таким образом, была получена зависимость плотности электронных состояний от  $\epsilon_2(\hbar\omega)$ .

Плотность электронных состояний аморфного NiSi была рассчитана с использованием спектральной зависимости оптических постоянных измеренных в эксперименте [5, 6].

Было установлено, что вклад в плотность электронных состояний в вершине валентной зоны и в зоне проводимости дают d и s электроны никеля и p электроны кремния. Полученные результаты могут быть использованы для интерпретации экспериментальных измерений проводимости.

1. Свойства, получение и применение тугоплавких соединений. Справочник. Редактор Косолапова Т.Я., Москва, Металлургия, 1986, 906 с.
2. Mott N.F., Davis E.A., Electron processes in non-crystalline materials, Oxford, Clarendon Press, 1979, v.1, 2.
3. Paul W., Connel G.A.N. and Temkin R.J. Amorphous germanium I. A model for the structural and optical properties//Advances in Physics-1973.-v. 22.-P. 531-580.
4. Hoshi H., Suzuki Y., Hirai M., UV absorption shape between 3,5 and 5,6 eV in very thin a-As<sub>2</sub>S<sub>3</sub> films at 80 K//J. Non-Cryst. Solids.-1987.-v.95/96.-P.749
5. Стецун А.И., Дворина Л.А., Расчет плотности электронных состояний аморфного дисилицида молибдена//Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении.-2007.-вып. 9.-С.103.
6. Сидоренко С.І., Макогон Ю.М., Волошко С.М., Матеріалознавство тонкоплівкових наноструктур. Дифузія і реакції. Київ, Наукова Думка, 2000, 571 с.