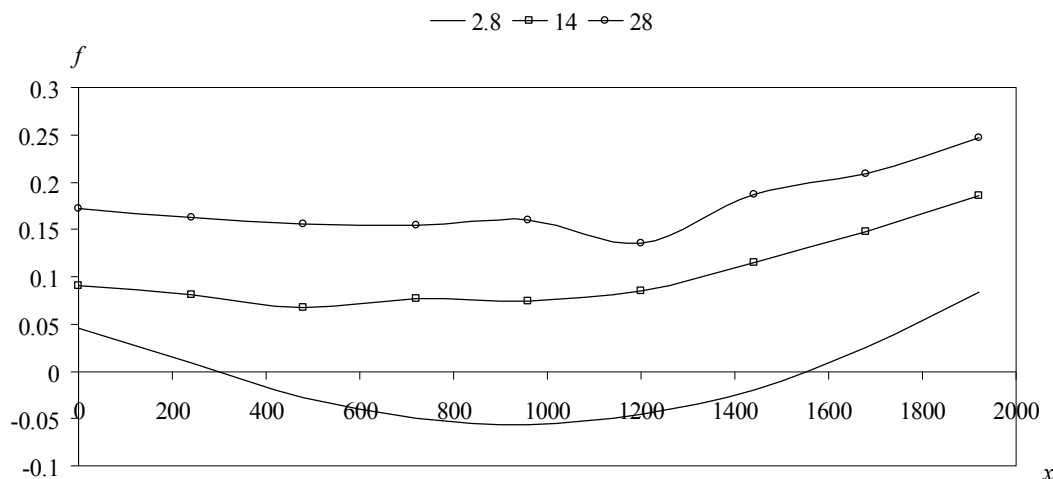


Изменение функции $f(x)$ по глубине скважины**Библиографические ссылки**

1. Шищенко Р. И., Есьман Б. И., Кондратенко П. И. Гидравлика промывочных жидкостей. – М. : Недра, 1976. – 294 с.
2. Булатов А. И., Пеньков А. И., Проселков Ю. М. Справочник по промывке скважин. – М. : Недра, 1984. – 317 с.
3. Михеев В. Л. Технологические свойства буровых растворов. – М. : Недра, 1979. – 239 с.
4. Тенев В. А., Шелковникова Ю. Н. Неизотермический режим промывки ствола скважины при бурении // Интеллектуал. системы в пр-ве. – 2013. – № 1. – С. 53–55.
5. Тенев В. А., Якимович Б. А. Генетические алгоритмы в моделировании систем. – Ижевск : Изд-во ИжГТУ, 2010. – 308 с.

* * *

V. A. Tenenev, DSc (Physics and Mathematics), Professor, Kalashnikov Izhevsk State Technical University
 Yu. N. Shelkovnikova, Engineer, Kalashnikov Izhevsk State Technical University

Controlling the purity of well's face by rheological characteristics of boring solution at non-isothermal mode of drilling

Opportunity of controlling the quality of drilling from the maximum face purification point of view by rheological characteristics of boring solution is considered. The task of the optimal control providing the maximum breed ablation was formulated on the base of mathematical model of non-isothermal mode of drilling.

Keywords: well, boring solution, purity of face, rheological characteristics

Получено: 19.11.13

УДК 539.149

П. А. Ушаков, доктор технических наук, профессор;
 Ижевский государственный технический университет имени М. Т. Калашникова
 Е. Ю. Батуркина, инженер
 Рязанский государственный радиотехнический университет

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕУПОРЯДОЧЕННОГО ПОЛУПРОВОДНИКА СТРУКТУРЫ GST225

Проведено численное моделирование нелегированной и легированной структуры GST225 в аморфном и кристаллическом состоянии. Выявлены наиболее вероятные точки расположения легирующих примесей в структуре. Построены 3d-модели суперячейки неупорядоченного полупроводника. Исследовано влияние легирующих примесей N, Si и O.

Ключевые слова: неупорядоченные полупроводники, фазовая память, халькогенидные стеклообразные полупроводники, управление свойствами материалов, легирование, наноразмерные пленки, наноэлектроника, квантово-механическое моделирование

Введение

Халькогенидные стеклообразные полупроводники (ХСП) сложного состава привлекают внимание исследователей в связи с их использованием в многочисленных устройствах микро-, нано- и оптоэлектроники. В последнее десятилетие пристальный

интерес вызывают работы по созданию устройств энергонезависимой фазовой памяти произвольного доступа (Phase Change Random Access Memory или PC-RAM) на основе этих материалов. Примерами коммерчески успешного использования устройств фазовой памяти с использованием халькогенидов

сурьмы и германия являются оптические диски хранения информации различных форматов: CD и CD-ROM [1], DVD-RAM, DVD-R/RW, DVD+R/RW [2] и диски последнего поколения формата Blu-ray (BD), включая многослойные диски, над созданием которого работал так называемый «9C консорциум» из 9 мировых лидеров на рынке электроники [3]. Принципиальным отличием формата BD от DVD является то, что для записи информации используется голубой лазер с меньшей длиной волны, что позволяет использовать устройства фокусировки с большей числовой апертурой. Это приводит к существенному увеличению плотности записи информации и дает возможность разместить 25 Гбайт информации на однослойных дисках и, соответственно, 50 и 100 Гбайт на двухслойных и трехслойных дисках стандартного 12 см размера. При этом скорость передачи данных составляет 36 Мбит/сек. За два десятилетия диски стандартного диаметра 12 см прошли значительный путь в развитии технических характеристик: от объема в 650 Мбайт (МБ) и скорости обмена информацией 4,3 Мбит/сек, характерных для CD и CD-ROM, до объема в 100 Гбайт (ГБ) при скорости обмена 36 Мбит/сек, характерных для трехслойных дисков Blu-ray.

Цель работы – моделирование, расчет параметров и выявление особенностей структуры нелегированных и легированных неупорядоченных полупроводников GST225.

Чтобы получить более полное представление о влиянии примесей на кристаллические и аморфные GST, необходимо провести более систематический анализ с учетом обеих фаз. Кроме этого, необходимо сравнить различные типы примесей и наметить связь между химической природой примесей и изменением атомной и электронной структуры, тем самым разработать руководство, чтобы выбрать оптимальные примеси.

Численное моделирование

Для решения поставленной задачи мы проводим численные расчеты, чтобы выявить атомную и электронную структуру GST, легированного Si, N, O. В настоящей работе мы ориентируемся на атомарное расположение примесей в решетке кристаллической и аморфной фазы GST, но следует отметить, что внешние эффекты, такие как сегрегация легирующих примесей вблизи границ зерен, могут оказать значительное влияние в реальных образцах.

Мы выполняем неэмпирические расчеты, основанные на теории функции плотности. Для молекулярной динамики и расчета электронной структуры используется свободно распространяемое ПО – пакет моделирования Vienna Ab-Initio [30]. Для описания электрон-ионных взаимодействий используется плагин Projector-augmented-wave pseudopotentials [31]. Энергии отсечки для базиса плоских волн выбрано равным 131, 184, 210 и 220 эВ для молекулярной динамики нелегированного и Si-, N-, O-легированных GST соответственно. Чем выше энергия отсечки используется при структурной релаксации, тем точнее выполняются условия расчета. Атомные позиции

находятся в свободном состоянии, пока силы Гельмана – Фейнмана на каждом атоме не будут сокращены до $0,03 \text{ эВ} / \text{\AA}$.

К точек в первой зоне Бриллюэна отбирают по-разному, в зависимости от размера элементарной ячейки и вычислительного режима. При изучении примесей в кристаллическом GST используется элементарная ячейка из 72 атомов. Для нее выбирается стандартно сетка $2 \times 2 \times 2$. При расчете элементарных ячеек больших размеров число атомов берется 216.

Для начала мы рассмотрим стабильные узлы легирующих примесей в кристаллическом состоянии (кубическая форма) GST (с-GST). На рис. 1, а показаны пять вариантов размещения легирующей примеси – X_{Ge} , X_{Sb} , X_{Te} , X_{vac} и X_i , где X указывает на место одного из атомов легирующих примесей Si, N, O. X_{Ge} , X_{Sb} и X_{Te} означают замещения атомов Ge, Sb и Te атомами примеси.

Можно видеть, что в спектре теплового излучения нанотрубки присутствуют узкие дискретные линии, чем он кардинально отличается от планковского. Появление таких линий связано с характером плотности фотонных состояний в нанотрубке. Конкретно эти линии соответствуют геометрическим резонансам. Интенсивность линии уменьшается с увеличением номера резонанса. Таким образом, тепловое излучение нанотрубки является частично когерентным (концентрируется в узких частотных интервалах).

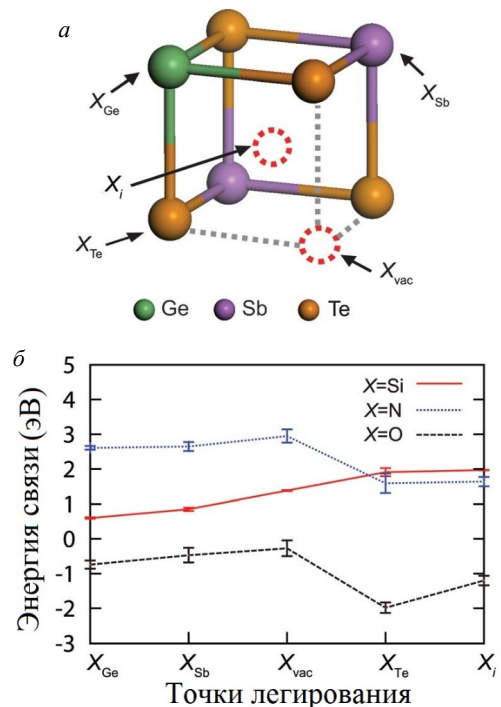


Рис. 1. Схема легирования: а – размещение пяти точек легирования в решетке GST; б – зависимость энергии связи от типа точки легирования для легирующих материалов

Точка X_{vac} примеси располагается на пустом узле решетки с-GST. Примеси, находящиеся внутри решетки куба, обозначается X_i . Изначально примесь

X_i размещается в решетке центра куба, но в процессе расчета они значительно смещаются от этой позиции. Для учета конфигурационных изменений мы случайным образом выбираем пять участков для каждого типа легирования, и результаты усредняются.

Мы используем суперячейку размером $13,7 \times 13,7 \times 12,2 \text{ \AA}^3$, содержащую 72 атома, и размещаем один атом примеси в ней. Это соответствует концентрации легирующей примеси 1,4 ат. %. Чтобы сравнить относительную стабильность среди точек легирования, вычислим энергию образования (для E_{for}) следующим образом:

$$E_{\text{for}} = E_{\text{tot}} - (X - \text{легируемый с - GST}) - E_{\text{tot}} (\text{нелегируемый с - GST}) - \mu_x + \mu_0,$$

где E_{tot} – полная энергия в элементарной ячейке с легирующей примесью или без нее; μ_x – химический потенциал примеси X . Последний член в уравнении μ_0 указывает на химический потенциал Ge, Sb, Te для X_{Ge} , X_{Sb} и X_{Te} соответственно, а для X_{vac} и X_i он равен нулю. Химические потенциалы для Si, Ge, Sb, Te атомов размещаются в точках самых полных энергий стабильной кристаллической структуры. Для N и O в качестве химического потенциала используется половина общей энергии двухатомной молекулы.

На рис. 1, б изображены вычисленные усредненные значения по пяти конфигурациям для E_{for} . Диапазон погрешности обозначен двумя черточками снизу и сверху точки. Погрешности у N и O больше, чем у Si. Это объясняется тем, что N и O образуют связи главным образом с атомами Ge, Sb и, следовательно, более чувствительны к месту расположения. Для Si самой стабильной точкой оказывается Si_{Ge} . Это происходит потому, что атомы Si химически наиболее близки к атомам Ge. Таким образом Si_{Ge} приводит к небольшой деформации решетки вокруг атома примеси.

На рис. 1, б E_{for} для N и O примесей отличаются на 3–4 эВ, хотя эти два элемента находятся рядом друг с другом в периодической таблице Менделеева. Энергии связи N_2 и O_2 молекул рассчитано 9,53 и 5,61 эВ соответственно. (Экспериментальные значения 9,79 эВ (N_2) и 5,15 эВ (O_2)) [33]. Таким образом, большие положительные значения E_{for} для примесей N в основном объясняются высокой энергией связи молекулы N_2 . Это также исключает возможность легирования спонтанно разделенными молекулами N_2 . Этот результат согласуется с другими расчетами легированного гексагонального GST азотом N [5, 29], а также с экспериментальными наблюдениями N_2 молекул в легированном азотом GST [34]. Тем не менее, столкновения ионов во время напыления в процессе роста легированного GST могут генерировать атомарный азот из N_2 молекул, которые затем осаждаются в напыляемую пленку.

На рис. 1, б показано, что N и O атомы располагаются предпочтительно в точках X_{Te} или X_i . Атомы азота двигаются по диагонали в места атомов Te и образуют три связи с атомами Ge или Sb. Подоб-

ная геометрия представлена на рис. 2, а, который показывает, что атом азота N связан с тремя атомами Ge.

Установлено, что E_{for} уменьшается с увеличением числа Ge-N связей. Это предполагает, что Ge-N связи являются более стабильными, чем связи Sb-N. Аналогичное наблюдается для O_{Te} , O-примеси смещаются от первоначального положения и изменяются формы связи с соседними атомами Ge (рис. 2, б). В отличие от преобладающей тройной координации N_{Te} , большинство O_{Te} являются двухвалентными. С другой стороны, N_i и O_i примеси обычно релаксируют к угловым точкам решетки (первоначально они были размещены в центре кубической решетки) и выталкивают соседние атомы Te, устанавливая тем самым связь с Ge или атомами Sb (рис. 2, в и 2, г). В результате локальные конфигурации аналогичны X_{Te} кроме дополнительной N_{Te} - или O_{Te} -связи. Большим перемещениям атомов Te способствует вакантное соседнее место.

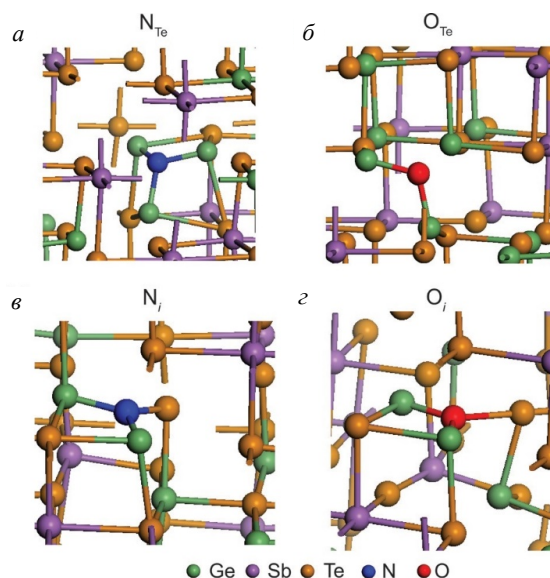


Рис. 2. Модель структуры GST: а – с примесями N_{Te} ; б – с примесями O_{Te} ; в – с примесями N_i ; г – с примесями O_i

Селективность связей Ge-N и Ge-O можно понять на основе электроотрицательности Полинга, которые равны 3,04 (N), 3,44 (O), 2,01 (Ge), 2,05 (Sb) и 2,1 (Te). Таким образом, наибольшая разница в электроотрицательности у N и O примесей позволяет устанавливать химическую связь с атомами Ge. Благодаря прочным связям Ge-N и Ge-O также можно предположить существование кристаллических фаз Ge_3N_4 и GeO_2 ; для нитридов германия наиболее стабильной фазой может быть $\beta\text{-Ge}_3\text{N}_4$ с атомами Ge в тетраэдрической конфигурации и N атомов в плоских, тройных координациях. Средняя длина Ge-N связи в $\beta\text{-Ge}_3\text{N}_4$ составляет 1,85 Å в нашем расчете. С другой стороны, существуют две фазы германия с аналогичными энергиями: β -кварц и структура рутила. Две фазы отличаются по энергии всего 0,01 эВ в рамках настоящего расчета. Тем не менее, локальные конфигурации разные, как (Ge, O) показывают коор-

динации (4,2) и (6,3) в β -кварце и структуре рутила соответственно. Это также приводит к различным Ge-O длинам связей 1,78 (β -кварц) и 1,89 (рутил) Å.

Влияние примесей на параметры решетки

Искажения решетки, вызванные примесями, влияют на ее параметры. Для того, чтобы проанализировать это количественно, мы рассмотрим кристаллические структуры при высокой концентрации легирования. На рис. 3 изменение параметров решетки вычисляются, когда четыре или восемь атомов легирующий примеси вводятся в каждую элементарную ячейку из 72 атомов с определенным типом легирования, что соответствует концентрации от 5 до 10 ат. %. Обе кубические формы и объемы оптимизированы в дополнение к атомной релаксации. Для облегчения сравнения с экспериментом равновесный параметр решетки установлен в положение $(V_{\text{relaxed}}/10)^{1/3}$. V_{relaxed} является окончательным объемом после оптимизации ячейки. Параметр решетки для нелегированного c-GST составляет 6,1 Å, что хорошо согласуется с экспериментальным значением, равным 5,99 Å.

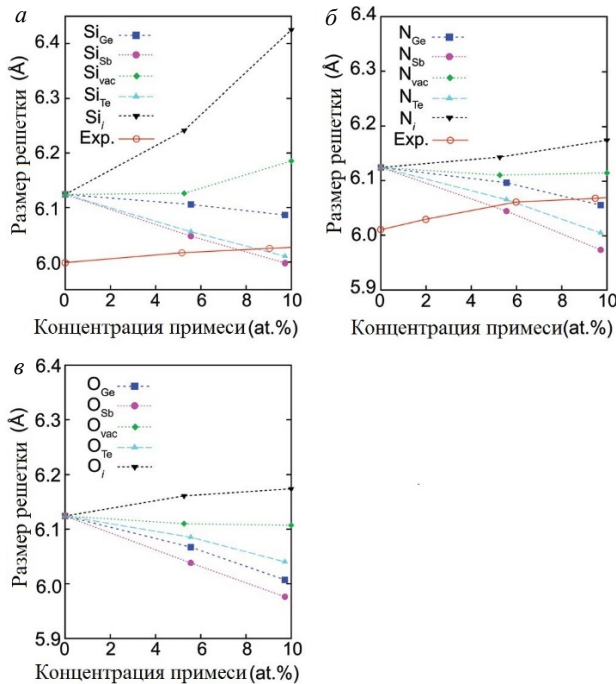


Рис. 3. Зависимость параметра решетки (а) Si-, (б) N- и (в) O- легированного кристаллического $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ относительно концентрации легирующей примеси. В (а) и (б) представлены экспериментальные данные

Несмотря на химическое разнообразие между изучаемыми примесями, параметры кристаллической решетки на рис. 3 показывают систематическое поведение, общее для всех примесей. Все примеси приводят к увеличению размеров решетки. Увеличение особенно заметно Si_i из-за большого размера атома. В противоположность этому, наиболее стабильная примесь Si_{Ge} уменьшает размеры решетки, так как размер атома кремния меньше, чем у Ge. В работе [16] параметры решетки Si-легированного c-GST были измерены по отноше-

нию к концентрации легирующей примеси, и они обозначены пустыми кружками на рис. 3, а. Это увеличение не объясняется Si_{Ge} примесями и может указывать на наличие некоторого количества Si_{vac} или Si_i (с энергетической точки зрения, Si_{vac} будет более благоприятным, как показано на рис. 1, б). Экспериментальные параметры решетки для N-легированного c-GST отмечены на рис. 3, б как пустые круги. Эти экспериментальные изменения хорошо объясняются N_i -примесями, подтверждая, что значительное количество примесей N существует в атомных состояниях. (Тем не менее, мы также отмечаем, что в эксперименте не наблюдалось заметное изменение параметра решетки.) Наличие примесей в междоузлиях показывает, что примеси не нарушают значительно оригинальную стехиометрию GST решетки.

Влияние примесей на параметры решетки

Чтобы исследовать, как влияют примеси на электронные структуры кристаллического c-GST, мы рассчитываем плотности состояний (DOS) (рис. 4) в суперячейке из 72 атомов с примесью по 4 стабильным точкам легирования (5 ат. % концентрации легирования). Для сравнения на рис. 4 показана плотность состояний для нелегированного c-GST.

Для анализа локализации электронов отложим на правой шкале значения коэффициента (IPR), который определяется следующим образом:

$$IPR = \frac{\sum_i |a_i|^4}{\left(\sum_i |a_i|^2\right)^2},$$

где $|a_i|^2$ указывает на частичный вес i -го атома. Коэффициент IPR предоставляет удобный способ для изучения пространственной локализации квантового состояния.

Например, если волновая функция равномерно распределена по атомам N, то IPR равна $1/N$.

На рис. 4 Si_{Ge} и N_i примеси уменьшили энергетическую щель, а примеси O_{Te} увеличили разрыв. Чтобы связать электронные структуры со свойствами материала, мы рассчитываем оптическую диэлектрическую проницаемость (ϵ^∞). Среднее значение ϵ^∞ указано на каждом графике. Увеличение ϵ^∞ для Si_{Ge} и уменьшение для O_{Te} в соответствии с изменением энергетической щели происходит потому, что уменьшение энергетической щели облегчает электронную поляризацию. Однако эксперимент в работе [15] показал, что показатель ϵ^∞ c-GST был увеличен с увеличением примесей. Это означает, что изменение макроскопической морфологии, например, размер зерна, будет также влиять на значение диэлектрической постоянной. В случае N легирования ϵ^∞ снижается, несмотря на уменьшение зазора щели. Это связано с усилением электронной локализации (см. ниже) вблизи валентной зоны и зоны проводимости по сравнению с нелегированным GST.

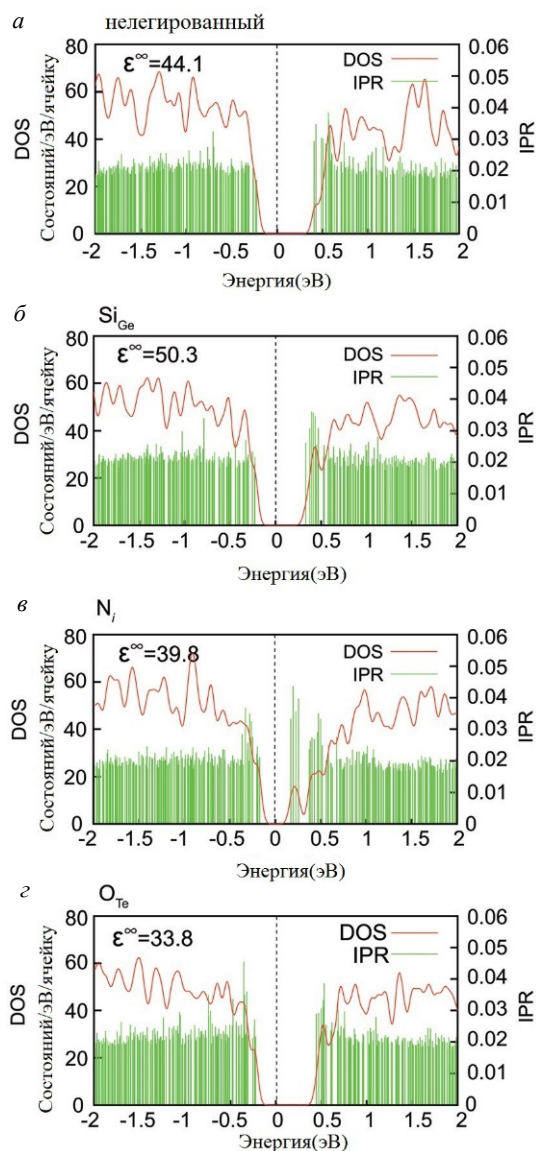


Рис. 4. Плотность состояний c-GST: а – без примеси; б – SiGe; в – Ni; з – OTe. Коэффициент IPR отмечен на правой шкале

Примеси в аморфном $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$

Увеличение IPR у края валентной зоны N_i и O_{Te} означает, что электроны в этой области энергий более локализованы, чем соответствующие состояния в нелегированных c-GST. Из анализа пространственного распределения волновых функций эти состояния оказываются распределены по 2p и 5p орбиталям примеси Te. Хорошо известно, что c-GST ведет себя как полупроводник p-типа [35], что связано с образованием вакансий у Ge [36]. Таким образом, локализованные состояния вблизи границы валентной зоны N_i и O_{Te} примеси будут играть как сильные центры рассеяния для p-типа проводимости в c-GST. Это согласуется с экспериментом и показывает, что удельное сопротивление c-GST возрастает при легировании [4, 10–12]. В отличие от этого, влияние Si_{Ge} примесей на проводимость c-GST будет относительно слабым, поскольку IPR очень похожа на нелегированный c-GST. Это было обнаружено в работе [4], и видно, что N-легированный c-GST обладает боль-

шим сопротивлением, чем Si-легированные образцы с похожими концентрации легирования.

Для получения аморфной структуры легированных GST (a-GST) мы имитируем закалку расплава при моделировании молекулярной динамики. Исходная кристаллическая структура содержит 216 атомов GST и 12 атомов легирующей примеси, которые располагаются в одной суперячейке. Первоначально примесь Si заменяем атомы Ge, а атомы N и O помещены в междоузлиях. В результате получаем концентрации легирования 5,6 и 5,3 ат. % для Si и N (или O) примесей соответственно. Поскольку точный состав легированного GST невозможно определить экспериментально, настоящий выбор начального типа легирования должен рассматриваться как один из вариантов. Для того чтобы отразить уменьшение плотности после аморфизации, объем суперячейки во время моделирования закалки расплава установим на $7360 \text{ \AA}^3$, который немного больше, чем $6935 \text{ \AA}^3$ у нелегированного c-GST. Как будет показано ниже, окончательная плотность аморфного материала варьируется в зависимости от легирующей примеси. Для моделирования закалки расплава температуру повышаем до 2000 К, и система расплавляется в течение 12 пс – стирание кристаллической фазы. Затем охлаждаем до 1000 К и расплавляем в течение 30 пс еще раз. Затем расплавленный состав охлаждаем с 1000 до 300 К со скоростью охлаждения 15 К/пс. Окончательная структура полностью аморфная при 0 К за счет оптимизации параметров решетки и атомных позиций.

Модели аморфных структур показаны на рис. 5, а–г.

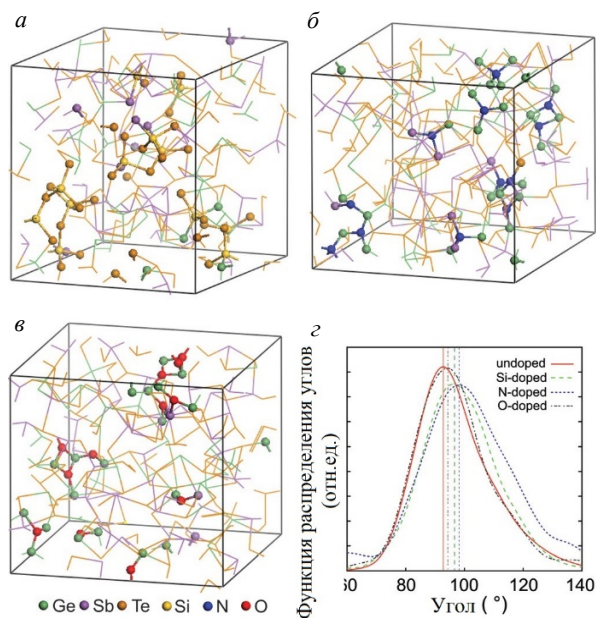


Рис. 5. Моделирование аморфных структур: а – Si-; б – N-; в – O-легированные GST (для наглядности отображены только атомы примеси и соседние атомы); з – функция распределения углов (ADF) вокруг атомов Ge (положения пиков отмечены в виде вертикальных линий)

Во всех случаях связь примесей с определенными видами атомов более преимущественна. В частности,

по большей части примеси Si образуют связи с атомами Te, в то время как Ge-N и Ge-O связи преобладают в N- и O-легированном GST. Это количественно подтверждено в таблице, которая показывает координационные числа легирующих атомов относительно разрешенных атомов.

Координационные числа легирующих добавок, разрешенных относительно соседних видов. Радиус среза был определен в первом приближении функции радиального распределения вокруг каждой примеси

	R_c (°)	X-Ge	X-Sb	X-Te	Общий
Si	2,9	0,42	0,67	2,92	4,00
N	2,4	2,75	0,50	0,08	3,33
O	2,3	2,25	0,33	0,00	2,58

Как видно из рис. 5, а, связи атомов Si и Te имеют тетраэдрическую форму, в отличие от атомов Ge, которые проявляются в октаэдрических и тетраэдрических конфигурациях [21]. Это потому, что меньший радиус атома Si способствует соединению sp^3 с более резонансным видом р-связей. На рис. 5, б N примеси в основном имеют три плоские связи. Это напоминает локальные структуры в β -Ge₃N₄.

Координационные числа легирующей примеси N можно объяснить смешанным характером конфигураций Ge в β -Ge₃N₄, где все атомы Ge тетракоординированные. Однако в охлажденном расплаве GST существуют как октаэдрические, так и тетраэдрические конфигурации [21]. Такая обстановка весьма близка к шпинель-типу γ -Ge₃N₄, который наблюдается при высоких давлениях [37], и является менее стабильной, чем β -Ge₃N₄ на 0,4 эВ в рамках вычислительной схемы. В γ -Ge₃N₄ две трети атомов Ge имеют гексогональную геометрию, а остальные атомы Ge – тетраэдрическую. Таким образом, атомы N с четырьмя связями в а-GST можно рассматривать как результат октаэдрических атомов Ge. Локальная конфигурация вокруг примесей O на рис. 5, в может быть описана подобными способами, в β -кварцевых GeO₂ все атомы Ge находятся в тетраэдрических конфигурациях и все атомы O двухвалентны. В отличие от этого атомы Ge в рутил GeO₂ близки к октаэдрической координации и атомы O трехвалентны. Мы находим, что 7 из 12 примесей O являются трехвалентными, что также согласуется с сосуществованием двух различных типов атомов Ge.

Выводы

Мы провели обширные неэмпирические вычисления кристаллических и аморфных структур GST, легированного атомами Si, N, O с целью объяснить выраженное воздействие легирующих примесей на атомном уровне. В кристаллической фазе наиболее благоприятное место для Si-легирования – это Si_{Ge}, в то время как N и O примеси замещают атомы Te из-за сильных связей Ge-N или Ge-O. Тем не менее сравнение параметров решетки с экспериментом показывает, что интерстициальные примеси должны существовать в значительных количествах. Анализ на плотности состояний указывает, что локализация

в верхней валентной зоне увеличивается на N- или O-легированных с-GST, что увеличивает сопротивление р-типа с-GST. Аморфные структуры легированных GST были получены моделированием охлаждения расплава. Было обнаружено, что для каждой примеси формируется предпочтительная связь, например Si-Te, Ge-N, и Ge-O. В частности, местные структуры связей вокруг атомов азота или кислорода хорошо объясняются на основе кристаллических структур Ge₃N₄ и GeO₂. Это похоже на кристаллическую фазу, но локальная геометрия связей является более благоприятной в аморфной фазе, благодаря которой проявляется повышенная устойчивость легированных а-GST. Анализ локальных структур опроверг точку зрения, что характер связи значительно изменяется на ковалентный. Легирующие примеси N повысили ковалентный характер Ge, но это было компенсировано увеличением металлической природы атомов Te. Мы также проводили моделирование отжига а-GST, и атомная структура перекристаллизовывалась в N-легированном GST и была близка к N_i примеси в с-GST. Тем не менее, сильная тенденция легирующей примеси N образовывать связи с атомами Ge вызвала серьезные деформации решетки на границе зерна. Легированная кремнием GST была частично кристаллической, но атомы Si остались в тетраэдрической конфигурации. Сравнение времени кристаллизации с нелегированным материалом подтвердило, что Si и O примеси замедляют процесс кристаллизации а-GST. Описание поведения примесей, электронной и атомной структуры, свойств материала для современных теоретических исследований будет служить полезным ориентиром в выборе оптимальных легирующих примесей, чтобы спроектировать специфические свойства GST.

Все результаты были получены в ходе выполнения государственного контракта № 14.513.11.0135 в рамках ФЦП «Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2007–2013 годы».

Библиографические ссылки

1. Welcome to Ecma International. URL: <http://www.ecma-international.org> (дата обращения: 04.12.2013).
2. Optical Data Storage. Phase-Change Media and Recording / Erwin R. Meinders, Andrei V. Mijiritskii, Liesbeth van Pieterse, Matthias Wuttig. – Berlin : Springer-Verlag, 2006. – (Philips Research Book Series, Vol. 4). – URL: http://download.springer.com/static/pdf/719/bfm%253A978-1-4020-4217-1%252F1.pdf?auth66=1386317499_c34c5e1d8e88a67c83481536a41a017c&ext=.pdf (дата обращения: 04.12.2013).
3. Narahara T., Kobayashi S., Hattori M., Shimpuku Y., van den Enden G., Kahlman J., van Dijk M. and van Woudenberg R. // Optical disc system for digital video recording. Jpn. J. Appl. Phys. 2000. V. 39. Part 1. No 2B. P. 912-919.
4. Florescu M., Busch K. and Dowling J. P., Phys. Rev. B 75, 201101(R) (2007).

5. S. Privitera, E. Rimini, R. Zonca. Appl. Phys. Lett., 85 (15), 3044 (2004).
6. T.-Y. Lee, K.H.P. Kim, D.-S. Suh, C. Kim, Y.-S. Kang, D.G. Cahill, D. Lee, M.-H. Lee, M.-H. Kwon, K.-B. Kim, Y. Khang. Appl. Phys. Lett., 94, 243 103 (2009).
7. T.-Y. Lee, S.-S. Yim, D. Lee, M.-H. Lee, D.-H. Ahn, K.-B. Kim. Appl. Phys. Lett., 89, 163 503 (2006).
8. C. Rivera-Rodriguez, E. Prokhorov, Yu. Kovalenko, E. Morales-Sanchez, J. Gonzalez-Hernandez. Appl. Surf. Sci., 247, 545 (2005).
9. S.M. Kim, M.J. Shin, D.J. Choi, K.N. Lee, S.K. Hong, Y.J. Park. Thin Sol. Films, 469–470, 322 (2004).
10. H. Horii, J. H. Yi, J. H. Park, Y. H. Ha, I. G. Baek, S. O. Park, Y. N. Hwang, S. H. Lee, Y. T. Kim, K. H. Lee, U.-I. Chung, and J. T. Moon, in Proceedings of the 2003 Symposium on VLSI Technology (IEEE, Piscataway, 2003), 177.
11. S. Privitera, E. Rimini, and R. Zonca, Appl. Phys. Lett. 85, 3044 (2004). 11B. Liu, Z. Song, T. Zhang, J. Xia, S. Feng, and B. Chen, Thin Solid Films 478, 49 (2005).
12. Y. Kim, M. H. Jang, K. Jeong, M.-H. Cho, K. H. Do, D.-H. Ko, H. C. Sohn, and M. G. Kim, Appl. Phys. Lett. 92, 061910 (2008).
13. R. M. Shelby and S. Raoux, J. Appl. Phys. 105, 104902 (2009).
14. T. H. Jeong, H. Seo, K. L. Lee, S. M. Choi, S. J. Kim, and S. Y. Kim, Jpn. J. Appl. Phys. 40, 1609 (2001).
15. S. M. Jeong, K. H. Kim, S. M. Choi, and H. L. Lee, Jpn. J. Appl. Phys. 48, 045503 (2009).
16. K. B. Borisenko, Y. Chen, S. Song, and D. J. H. Cockayne, Chem. Mater. 21, 5244 (2009).
17. Z. Sun, J. Zhou, and R. Ahuja, Phys. Rev. Lett. 96, 055507 (2006).
18. J.-H. Eom, Y.-G. Yoon, C. Park, H. Lee, J. Im, D.-S. Suh, J.-S. Noh, Y. Khang, and J. Ihm, Phys. Rev. B 73, 214202 (2006).
19. J. Akola and R. O. Jones, Phys. Rev. B 76, 235201 (2007).
20. S. Caravati, M. Bernasconi, T. D. Kühne, M. Krack, and M. Parrinello, Appl. Phys. Lett. 91, 171906 (2007).
21. J. Hegedus and S. R. Elliott, Nat. Mater. 7, 399 (2008).
22. J. Akola, R. O. Jones, S. Kohara, S. Kimura, K. Kobayashi, M. Takata, T. Matsunaga, R. Kojima, and N. Yamada, Phys. Rev. B 80, 020201(R) (2009).
23. Z. Sun, J. Zhou, A. Blomqvist, B. Johansson, and R. Ahuja, Phys. Rev. Lett. 102, 075504 (2009).
24. E. Cho, J. Im, C. Park, W. J. Son, D. Kim, H. Horii, J. Ihm, and S. Han, J. Phys.: Condens. Matter 22, 205504 (2010).
25. J. Im, E. Cho, D. Kim, H. Horii, J. Ihm, and S. Han, Phys. Rev. B 81, 245211 (2010).
26. B. Huang and J. Robertson, Phys. Rev. B 81, 081204(R) (2010).
27. Z. Sun, J. Zhou, H. Shin, A. Blomqvist, and R. Ahuja, Appl. Phys. Lett. 93, 241908 (2008).
28. S. J. Kim, J. H. Choi, S. C. Lee, B. Cheong, D. S. Jeong, and C. Park, J. Appl. Phys. 107, 103522 (2010).
29. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B 47, 558 (1993).
30. P. E. Blöchl, Phys. Rev. B 50, 17953 (1994).
31. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
32. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 66th ed., edited by R. C. Weast (CRC Press, Boca Raton, 1986).
33. K. Kim, J.-C. Park, J.-G. Chung, S. A. Song, M.-C. Jung, Y. M. Lee, H.-J. Shin, B. Kuh, Y. Ha, and J.-S. Noh, Appl. Phys. Lett. 89, 243520 (2006).
34. B. S. Lee, J. R. Abelson, S. G. Bishop, D.-H. Kang, B. Cheong, and K.-B. Kim, J. Appl. Phys. 97, 093509 (2005).
35. S. Caravati, M. Bernasconi, T. D. Kühne, M. Krack, and M. Parrinello, J. Phys.: Condens. Matter 21, 255501 (2009).
36. J. Dong, O. F. Sankey, S. K. Deb, G. Wolf, and P. F. McMillan, Phys. Rev. B 61, 11979 (2000).
37. M. Mitra, Y. Jung, D. S. Gianola, and R. Agarwal, Appl. Phys. Lett. 96, 222111 (2010).
38. D. Ielmini and Y. Zhang, J. Appl. Phys. 102, 054517 (2007).
39. Y. Kim, U. Hwang, Y. J. Cho, H. M. Park, M. H. Cho, P. Cho, and J. Lee, Appl. Phys. Lett. 90, 021908 (2007).
40. Street, R. A. States in the Gap in Glassy Semiconductors / R. A. Street, N. F. Mott // Phys. Rev. Lett. – 1975. – Vol. 35, No. 19. – Pp. 1293-1296.

* * *

P. A. Ushakov, DSc in Engineering, Professor; Kalashnikov Izhevsk State Technical University
E. Yu. Baturkina, Engineer, Ryazan State Radio Engineering University

Modeling of disordered semiconductor of GST225 structure

Numerical modeling of unalloyed and alloyed GST225 structure in amorphous and crystalline states is carried out. The most probable locations of alloying impurities in the structure are revealed. 3D models of a super-cell of the disordered semiconductor are constructed. Influence of N, Si, and O alloying impurities is investigated.

Keywords: disordered semiconductors, phase memory, chalcogenide glass-like semiconductor, material properties control, alloying, nano-dimensional films, nano-electronics, quantum mechanical modeling

Получено: 20.11.13