

## TÍNH CHẤT QUANG CỦA HỢP CHẤT $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$

NGUYỄN HUY PHÚC

Trường Đại học Công nghiệp Thành phố Hồ Chí Minh

nguyenhuyphuc@iuh.edu.vn

**Tóm tắt.** Hợp chất  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  (viết tắt là GST225) có hai trạng thái chính là vô định hình và kết tinh. Ở trạng thái kết tinh, có hai dạng cấu trúc mạng tinh thể: Dạng khối lập phương tâm diện *fcc* (kết tinh tại nhiệt độ  $150^\circ\text{C}$ ). Các hệ số quang học ( $n$ ,  $k$ ,  $\alpha$ ) của GST225 phụ thuộc vào bước sóng ánh sáng. Có sự khác biệt rất lớn của các hệ số quang học này giữa hai trạng thái vô định hình và kết tinh. Sự khác biệt này được gọi là độ tương phản quang. Thông số rất quan trọng đối với chất bán dẫn họ GST225 là độ rộng vùng cấm ( $E_g$ ). Đối với GST225 độ rộng vùng cấm  $E_g$  trong khoảng từ 0,61 eV đến 0,64 eV ở trạng thái vô định hình và 0,4 eV ở trạng thái kết tinh.

**Từ khóa.** Chất bán dẫn họ Chalcogenide, bộ nhớ chuyển pha, vật liệu thông minh, GST, GST225.

## OPTICAL PROPERTIES OF $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ COMPOUND

**Abstract.**  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  (GST225) compound has two main phases: amorphous and crystalline. In crystalline state, there are two types of lattice structure: *fcc* face-center-cube (crystallized at temperature of  $150^\circ\text{C}$ ). The optical constants ( $n$ ,  $k$ ,  $\alpha$ ) of GST225 depend on the wavelength. There are differences of these optical constants between amorphous and crystalline states. This difference is called optical contrast. The very important parameter for the GST225 is the band gap ( $E_g$ ). For GST225 band gap  $E_g$  is from 0.61 eV to 0.64 eV in amorphous state and 0.4 eV in crystalline state.

**Keywords.** Chalcogenide materials, Phase change memory, Optical band gap, GST, GST225, Ellipsometry.

### 1 GIỚI THIỆU

Hợp chất chất bán dẫn vô định hình họ chalcogen (tên gọi tiếng anh “Chalcogenide Glassy Semiconductors”, viết tắt “CGS”) có trạng thái vô định hình như thủy tinh ở nhiệt độ phòng, mặc dù trạng thái tinh thể của chúng thuộc dạng ổn định nhiệt. Các trạng thái vô định hình và tinh thể của cùng một vật liệu có sự khác biệt đáng kể về các tính chất vật lý của chúng, đặc biệt là các tính chất điện và quang. Chúng có thể chuyển liên tục giữa hai trạng thái: chuyển đổi từ trạng thái vô định hình sang trạng thái tinh thể và ngược lại dưới sự tác động nhiệt hay tác động xung điện. Dựa trên sự khác biệt này, hợp chất CGS đã được sử dụng rộng rãi trong các thiết bị lưu trữ thông tin. Sự thành công của việc ứng dụng hợp chất này là dùng làm lớp lưu trữ dữ liệu trong đĩa quang học ghi lại nhiều lần (CD-RW, DVD-RW, Blu-Ray) [1]. Cộng đồng nghiên cứu và phát triển ứng dụng vật liệu chuyển pha đã nhận được một lợi thế lớn khi Yamada và các tác giả khác [2] phát hiện vật liệu  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  (viết tắt GST225) có tính chất nhanh chóng chuyển đổi pha vào năm 1987. Phát hiện này mang tính đột phá, sử dụng hợp chất cấu tạo từ cặp GeTe và  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  cho phép đổi mới toàn bộ mới công nghệ lưu trữ và thành công đến ngày hôm nay.

Trong bài báo [1], các nhà nghiên cứu thấy rằng đối với hợp chất trong quá trình ghi thông tin thì GST225 được kết tinh dưới dạng mạng tinh thể hình lập phương gần giống với cấu trúc mạng tinh thể NaCl siêu bền. Ở trạng thái *fcc*, mạng tinh thể con thứ nhất (sublattice) tạo bởi nguyên tử Te; các mạng tinh thể con thứ hai bao gồm Ge, Sb, và 20% khoảng trống. Trong bài báo [3], phần lớn khoảng trống trong mạng tinh thể được giải thích bởi sự vắng mặt của một số lượng lớn electron hóa trị trong quá trình hình thành liên kết nguyên tử Ge và Sb với Te. Kết luận này được khẳng định bằng kết quả của [4, 5]. Phân tích GST225 ở trạng thái *fcc* sử dụng phương pháp EXAFS cho thấy Ge-Te và Sb-Te có thể được phân loại thành những liên kết ngắn và dài. Độ dài liên kết của Ge-Te và Sb-Te ở 2,83, 3,2 Å và 2,91, 3,2 Å. Trong một phân tử GST225 ngoài liên kết cộng hóa trị chiếm phần lớn, còn có một số lượng nhỏ liên kết cộng hưởng (liên kết cho nhận).

Phương pháp nhiễu xạ tia X (XRD) cho thấy, có một sự lệch đáng kể về vị trí của nguyên tử Ge và Sb từ các nút mạng tương ứng của mạng tinh thể dạng fcc. Do sự khác biệt giữa bán kính của các nguyên tử Te, Ge, Sb, dẫn đến cấu trúc mạng tinh thể GST225 không hoàn toàn giống với cấu trúc mạng tinh thể của muối ăn (NaCl). Các nguyên tử Te được bố trí vào vị trí 4a (những góc đỉnh của ion dương trong mạng tinh thể); hoặc vị trí 4b (những góc đỉnh của ion âm trong mạng tinh thể) [6]. Trong [7], các nhà nghiên cứu đã chỉ ra rằng trạng thái fcc có thể được hình thành từ các khối nguyên tử liên kết (block). Trong mỗi khối, các nguyên tử bị ràng buộc bởi liên kết ngắn và mạnh; trong khi đó, các khối được liên kết bởi các liên kết dài và yếu. Các khối được sắp xếp có trật tự để các nguyên tử Te có thể tạo thành một mạng tinh thể dạng fcc. Tuy nhiên, cấu trúc mạng tinh thể cho phép mỗi khối xoay 900 theo trục của nó. Tiếp đến, các nguyên tử Ge, Sb và các chỗ trống sắp xếp một cách ngẫu nhiên tạo thành mạng tinh thể fcc thứ hai.

Ở trạng thái vô định hình, các liên kết cộng hưởng bị phá hủy, trong khi liên kết hóa trị trở nên ngắn và mạnh hơn. Theo số liệu EXAFS [7], chiều dài của liên kết ngắn của Ge-Te giảm từ 2,84 đến 2,61 Å, trong khi chiều dài liên kết ngắn của Sb-Te giảm 2,91-2,85 Å. Trong [8], sử dụng phương pháp XANES (X-ray Absorption Near Edge Structure) đã xác định được các nguyên tử Ge chuyển từ liên kết 6 hóa trị ở trạng thái kết tinh sang liên kết 4 hóa trị ở trạng thái vô định hình. Chiều dài liên kết của Ge-Te là 2,61 Å ở trạng thái vô định hình và ở trạng thái fcc là 6,02 Å. Mô hình nguyên tử Ge chuyển từ liên kết 6 hóa trị sang liên kết 4 hóa trị được đặt tên là mô hình “bật dù” (umbrella flip) [3, 6]. Vị trí của nguyên tử Sb thay đổi không đáng kể trong quá trình chuyển sang trạng thái vô định hình, trong khi sự thay đổi độ dài của liên kết Te-Sb trong trạng thái vô định hình được kết hợp với một sự thay đổi của vị trí nguyên tử Ge.

Nghiên cứu các tính chất quang của GST225 là rất cần thiết cho việc ứng dụng công nghệ ghi, đọc và xóa dữ liệu. Mặc dù những tính chất này có tầm quan trọng, nhưng nghiên cứu về các đặc tính này vẫn còn hạn chế. Để lưu trữ dữ liệu quang học, hệ số khúc xạ  $n$ , hệ số tắt dần  $k$ , hệ số hấp thụ  $\alpha = 4\pi k/\lambda$  là vô cùng quan trọng bởi vì nó xác định hiệu quả của sự hấp thụ của ánh sáng laser, cũng như độ tương phản quang. Các hệ số quang học, trong thực tế, không phải là hằng số mà phụ thuộc vào bước sóng  $\lambda$ .

Trong bài này, tôi khảo sát tính chất quang của màng mỏng GST225 phủ trên đế Si và đế thủy tinh và màng được nung nhiệt sau khi chế tạo. Tính chất quang của màng trước và sau khi nung được khảo sát bằng các phương pháp khác nhau: XRD, phổ ellipsometry và AFM cho màng phủ trên đế Si; quang phổ hấp thụ cho màng phủ trên đế thủy tinh.

## 2 THÍ NGHIỆM

### 2.1 Thí nghiệm

Màng mỏng GST225 được tạo bằng phương pháp bốc bay nhiệt trong chân không, trên mặt đế là Si (dùng để đo hệ số phản quang) và thủy tinh K8 (dùng để đo hệ số hấp thụ). Áp suất và nhiệt độ của bồn trong quá trình bay bốc nhiệt luôn giữ ở  $10^{-4}$  Pa và 630°C. Để thu được màng mỏng GST225 ở trạng thái kết tinh, mẫu thí nghiệm được nung nóng ở nhiệt độ  $170 \pm 1^\circ\text{C}$  trong điều kiện khí trơ Ar, trong thời gian 5 giờ. Thời gian và nhiệt độ được gia nhiệt được lựa chọn để chắc chắn mẫu thí nghiệm chuyển trạng thái hoàn toàn, theo tài liệu [1, 9].

Phổ nhiễu xạ tia X (XRD) của màng mỏng trước và sau khi nung đã được đo, nhằm khẳng định trạng thái vô định hình và trạng thái kết tinh, phục vụ cho quá trình nghiên cứu. Phổ XRD được đo bởi máy quang phổ Bruker D8 Advance, Cu  $K_\alpha$   $\lambda=0.15481$  nm, với bước 0,02°. Góc quét được thiết lập trong khoảng  $2\theta=2-138^\circ$ , với độ chính xác của góc quét là 0.005°.

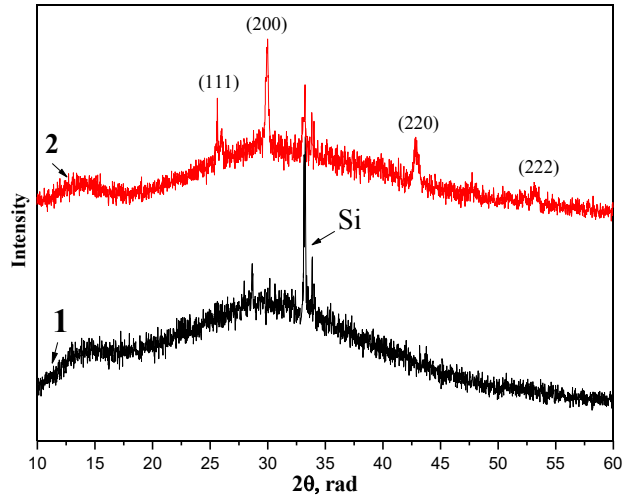
Để đo các hệ số quang học, máy đo quang phổ ellipsometer ELLIPSE-1881A đã được sử dụng. Ánh sáng đến và phản xạ lại từ mẫu vật, với bước sóng thay đổi trong khoảng 380-1050 nm và góc đến  $70^\circ$ . Hệ số hấp thụ của mẫu thí nghiệm được tính toán dựa trên phổ truyền qua, đo bởi quang phổ kế Cary 5000. Bước sóng của phổ thu được trong khoảng 400-2500 nm, với độ chính xác  $\pm 0,05$  nm.

### 2.2 Phương pháp tính và thảo luận kết quả

#### a Phổ nhiễu xạ XRD

Phổ nhiễu xạ XRD của màng mỏng GST225 phủ trên đế Si trước (đường 1, màu đen) và sau (đường 2, màu đỏ) khi gia nhiệt được thể hiện ở hình 1. Theo kết quả đo, phổ 1 không có đỉnh cực đại nào ngoài đỉnh tại góc quét  $2\theta=33,41^\circ$ , đặc trưng của đế Si. Trong khi đó, bốn cực đại nhiễu xạ thu được trên phổ 2

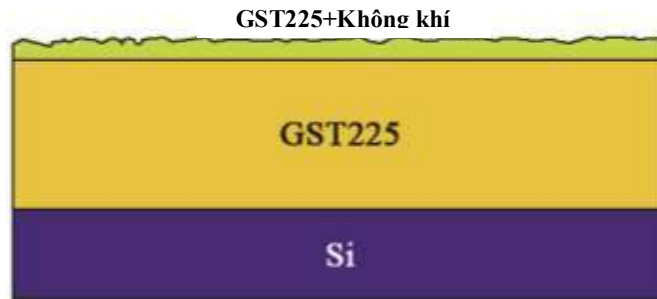
tại  $2\theta \sim 25,6^\circ$ ;  $30^\circ$ ;  $42,8^\circ$  và  $53,3^\circ$ . Theo các nghiên cứu trước đó [9, 10, 11, 12, 13], các đỉnh này lần lượt tương ứng với các hướng (111), (200), (220) và (222) của mạng tinh thể GST225 trong pha *fcc*. Điều này phù hợp với quá trình nung nhiệt tại  $170^\circ$ , điều kiện để xảy ra quá trình chuyển pha từ trạng thái vô định hình qua trạng thái tinh thể *fcc* của GST225.



Hình 1. Phổ XRD của màng mỏng GST225 trên đế Si

#### b Phổ ellipsometry và hằng số phản quang

Đối với các màng mỏng GST225 vô định hình và kết tinh, phổ ellipsometry  $\Psi$  và  $\Delta$  được khảo sát. Dựa trên các phổ này, hệ số  $n$  và  $k$  bằng cách mô phỏng với cấu trúc màng mỏng hai lớp như mô tả trên hình 2 được sử dụng để tính toán. Trong mô hình này, màng mỏng GST225 được xem như một cấu trúc bởi hai lớp (không tính lớp dưới cùng – lớp đế Si). Lớp chính, chiếm phần lớn tỉ lệ là lớp GST225 với bề dày  $d_1$ . Lớp thứ 2, nằm trên cùng, lớp bề mặt, có bề dày  $d_2$ . Ngoài ra, lớp thứ hai được xem như một hệ hỗn hợp bao gồm GST225 (95%) và không khí (5%). Việc thêm lớp thứ hai nhằm tính đến sự đóng góp của bề mặt màng mỏng. Khi vật liệu có kích thước nanomet, số nguyên tử nằm trên bề mặt sẽ chiếm tỉ lệ đáng kể so với tổng số nguyên tử. Chính vì vậy các hiệu ứng có liên quan đến bề mặt, gọi tắt là hiệu ứng bề mặt sẽ trở nên quan trọng, làm cho tính chất của vật liệu có kích thước nanomet khác biệt so với vật liệu ở dạng khối. Việc tính thêm tính chất bề mặt trong quá trình mô phỏng, sẽ cho đến kết quả tính toán chính xác hơn.



Hình 2. Mô hình màng mỏng 2 lớp GST225 trên đế Si

Quá trình mô phỏng để tính toán hệ số  $n$  và  $k$  dựa trên phổ ellipsometry, sử dụng công thức Forouhi-Bloomer [14]:

$$k(\hbar\omega) = \frac{A(E - E_g)^2}{E^2 - BE + C} \quad (1) \quad \text{và} \quad n(\hbar\omega) = n(\infty) + \frac{B_0 E + C_0}{E^2 - BE + C} \quad (2)$$

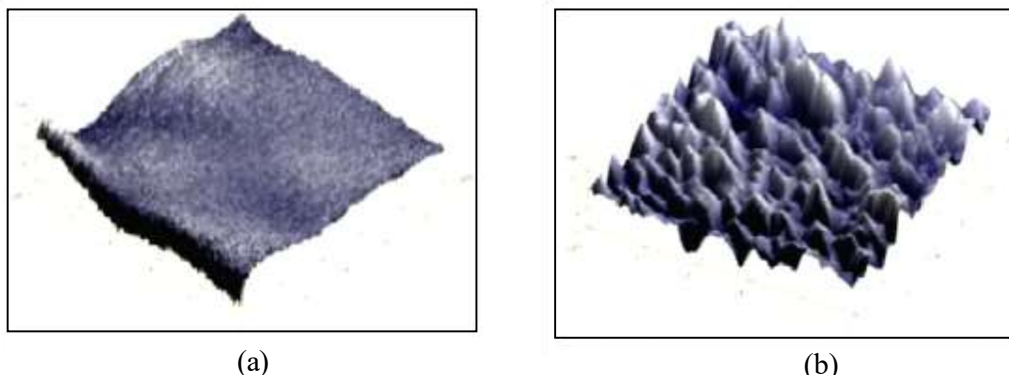
Trong đó,  $E$  – năng lượng photon;  $E_g$  – độ rộng vùng cấm quang;  $A, B, C, B_0, C_0$  – hằng số mô phỏng;  $n(\infty)$  - hệ số khúc xạ khi năng lượng photon rất lớn.

Bảng 1. Kết quả mô phỏng phổ  $n$  và  $k$  theo phổ ellipsometry.

Mẫu đo	$d_1$ , nm	$d_2$ , nm	$n(\infty)$	$E_g$ , eV	A	B	C	q (sai số)
a-GST225 (vô định hình)	71,32	2,50	2,72	0,64	0,59	3	2,77	0,01
c-GST225 (kết tinh)	83,25	15,03	0,58	0,40	3,29	3	3,46	0,01

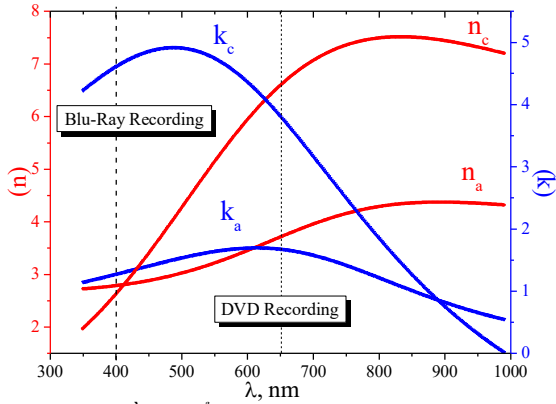
Căn cứ vào kết quả trình bày trong bảng 1, nhận thấy rằng, khi chuyển từ trạng thái vô định hình sang trạng thái kết tinh, độ rộng vùng cấm quang  $E_g$  của GST225 giảm từ 0,64 eV xuống 0,4 eV. Điều này bắt nguồn từ sự bố trí lại trong cấu trúc phân tử của GST225 trong quá trình chuyển từ pha vô định hình qua trạng thái tinh thể *fcc* [15]. Giá trị  $E_g$  tính được tương ứng với giá trị  $E_g$  (0,63 eV và 0,4 eV) trong công bố [16]. Tuy nhiên, công bố [16] đo giá trị  $E_g$  từ phổ hằng số điện môi. Sự tương trùng về số liệu trong các cách đo khác nhau và sai số tính nhỏ (0,01) đã thể hiện sự đúng đắn khi sử dụng mô hình hai lớp của màng mỏng.

Bên cạnh đó, một điểm đáng chú ý là sự thay đổi đáng kể về tính chất bề mặt của màng mỏng trước và sau khi nung: bề dày  $d_2$  tăng từ 2,5 nm (trạng thái vô định hình) lên 15,03 nm (trạng thái kết tinh). Theo tài liệu [17], các tác giả đã quan sát được sự thay đổi bề mặt rõ rệt trước và sau khi nung thông qua khảo sát đo độ gồ ghề của bề mặt màng trong trạng thái vô định hình và trạng thái tinh thể. Trong khi bề mặt của màng trong trạng thái vô định hình khá phẳng (độ gồ ghề dưới 2 nm), màng sau khi nung có độ gồ ghề vào khoảng 15 nm (xem hình 3).

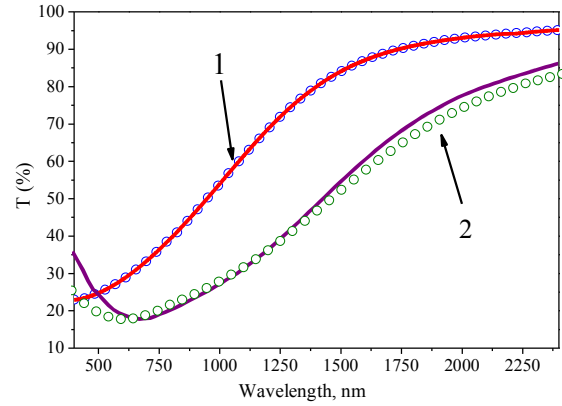


Hình 3. Hình chụp AFM bề mặt của màng mỏng GST225 trên đế Si trước khi gia nhiệt (a) và sau khi gia nhiệt (b) [17]

Áp dụng giá trị  $E_g$  thu được vào công thức (1) và (2), cho phép tính sự thay đổi của  $n$  và  $k$  theo bước sóng  $\lambda$ . Hàm thu được  $n(\lambda)$  và  $k(\lambda)$  được vẽ trên hình 4 bằng đường màu đỏ và màu xanh một cách tương ứng. Theo hình 4 cho thấy, hệ số khúc xạ  $n$  trong vùng bước sóng 350 nm đến 1000 nm, có giá trị thay đổi trong khoảng từ 2,6 đến 4,3 là dạng đặc trưng của màng mỏng của GST225 ở trạng thái vô định hình [2, 9, 13, 16]. Sau khi chuyển sang trạng thái kết tinh, hệ số khúc xạ  $n$  và hệ số tắt dần  $k$  đều tăng trong vùng bước sóng tương ứng từ 410 nm đến 1000 nm và 350 nm đến 870 nm. Hơn thế nữa, cực đại của hệ số  $n_c$  và  $k_c$  dịch chuyển về phía mức năng lượng photon cao (hay về phía bước sóng ngắn) so với hệ số  $n_a$  và  $k_a$ .



Hình 4: Đồ thị thể hiện sự phụ thuộc  $n$ ,  $k$  (tính theo công thức 1 và 2) vào bước sóng của màng mỏng hợp chất GST225 ở trạng thái vô định hình (a) và trạng thái kết tinh (c) (trên đế Si)



Hình 5. Quang phổ truyền qua  $T$  đo được (các điểm tròn) và tính toán theo mô phỏng (đường nối liền) của màng mỏng GST225 vô định hình (1) và kết tinh (2) (trên đế thủy tinh)

Độ tương phản quang được xác định bởi sự chênh lệch hệ số khúc xạ (dạng số phức) giữa 2 trạng thái. Hệ số khúc xạ dạng số phức được biểu diễn:  $\tilde{n} = n + ik$  (3)

Độ tương phản quang:  $\Delta n = \tilde{n}_{(\text{kết tinh})} - \tilde{n}_{(\text{vô định hình})} = \Delta n + i\Delta k$  (4)

Độ tương phản quang tính được trong thí nghiệm này dành cho hai bước sóng  $\lambda = 400$  nm là  $0,18 + i3,34$ , và  $\lambda = 650$  nm là  $2,86 + i2,13$ . Sự quan tâm đặc biệt được thể hiện cho hai giá trị bước sóng này, vì trong kỹ thuật ghi và xóa đĩa quang, hai bước sóng này tương ứng với bước sóng của laser sử dụng trong đầu đọc-ghi Blu-Ray và DVD.

### c Hệ số hấp thụ và năng lượng Urbach

Đối với màng phủ trên đế thủy tinh, phương pháp ellipsometry không thể áp dụng được. Do đó, các màng này được khảo sát bằng phương pháp đo phổ truyền qua. Thông qua phép đo này, hệ số hấp thụ  $\alpha$  và bề dày của màng mỏng  $d$  được tính toán dựa trên quang phổ truyền qua  $T(\lambda)$ , sử dụng thuật toán của chương trình PUMA [18]. Trong quá trình tính, phổ truyền qua được mô phỏng theo công thức:

$$T(\lambda) = \frac{A_1 e^{-\alpha d}}{B_1 - C_1 e^{-\alpha d} + D_1 e^{-2\alpha d}}; \alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (3)$$

Trong đó,  $A_1$ ,  $B_1$ ,  $C_1$ ,  $D_1$  – hằng số mô phỏng; hệ số tắt dần  $k$ , hệ số hấp thụ  $\alpha$  và  $d$  – tổng bề dày màng mỏng (không tính đế).

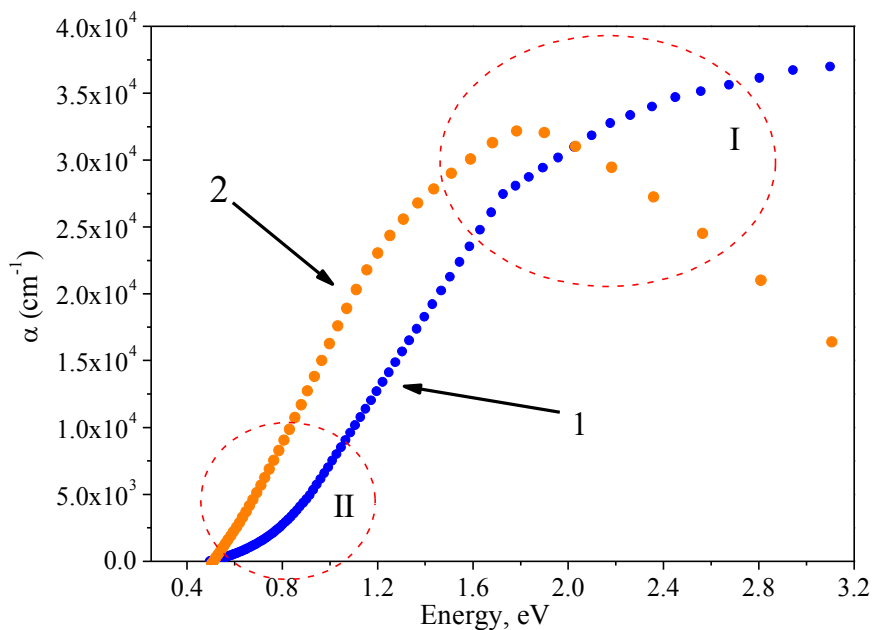
Kết quả tính toán mô phỏng theo công thức (3) sử dụng thuật toán của chương trình PUMA và kết quả đo được thể hiện ở hình 5, với sai số  $\sigma^2 = 7.65 \cdot 10^{-4}$ .

Hình 6 thể hiện sự phụ thuộc của hệ số hấp thụ vào bước sóng của màng mỏng vô định hình và kết tinh GST225. Phổ hệ số hấp thụ là đường cong, với hai vùng đặc trưng của vật liệu họ GST. Tại vùng với năng lượng photon lớn hơn 1,2 eV (vùng I trên hình 6), đường cong tương ứng với phụ thuộc bậc 2, dạng parabol theo mô hình của Tauc [19].

$$\alpha \hbar \omega = B(\hbar \omega - E_g)^2, \hbar \omega > E_g$$

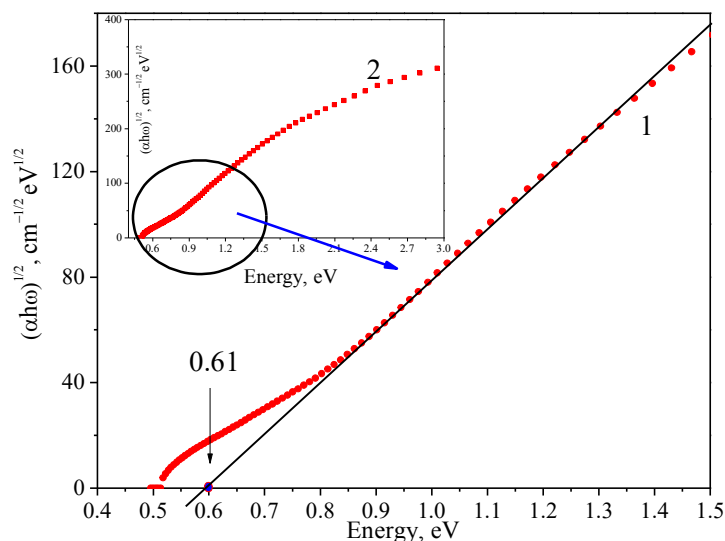
Tại vùng với năng lượng photon nhỏ hơn 1,2 eV, quan sát được Urbach tail (năng lượng Urbach –  $E_0$ ) [19], đường cong tương ứng với sự phụ thuộc theo hàm số e (vùng II trên hình 6). Những vùng với đường cong đặc trưng này, biên hấp thụ (Absorption edge), cũng được đề cập đến trong tài liệu [16]. Đường cong đặc trưng này chỉ quan sát được đối với màng mỏng GST225 vô định hình. Trong trường hợp màng mỏng GST225 kết tinh, Urbach tail không tồn tại, do đó không quan sát được đường cong trong vùng II, trên đồ thị 2, hình 6.

$$\alpha = \alpha_0 \exp\left(\frac{\hbar \omega - E_g}{E_0}\right), \hbar \omega < E_g$$



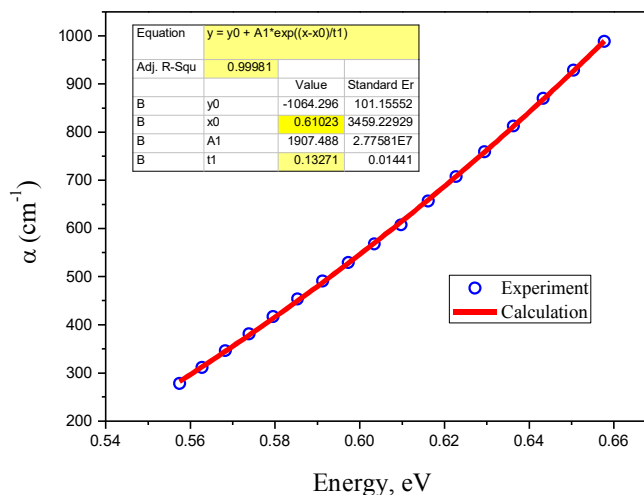
Hình 6. Phổ hệ số hấp thụ theo bước sóng của màng mỏng GST225 vô định hình (1) và kết tinh (2)

Để xác định giá trị độ rộng vùng cấm quang, các phép tính đã được triển khai, lấy đường cong 1, trên hình 6 làm mẫu. Từ đồ thị hình 6, đường cong 1 được dựng lại dưới dạng phụ thuộc  $(\alpha\hbar\omega)^{1/2} = f(\hbar\omega)$  (hình 7, đường 2). Căn cứ vào đường cong 2, chọn vùng phụ thuộc tuyến tính. Dọc theo các điểm đã chọn, dựng đường thẳng đi qua và cắt trục năng lượng. Giá trị của điểm cắt trên trục năng lượng chính là giá trị của độ rộng vùng cấm quang  $E_g$  (hình 7, đường 1). Tính toán cho thấy, giá trị  $E_g$  trong trường hợp này là 0,61 eV.



Hình 7. Đồ thị chuyển đổi để tính giá trị  $E_g$  của màng mỏng vô định hình GST225

Để xác định giá trị năng lượng Urbach  $E_0$  (năng lượng gắn liền với sự sắp xếp không trật tự trong cấu trúc phân tử). Từ vùng II của đồ thị hình 6, tách đường cong tương ứng, sau đó tiến hành tính gần đúng theo hàm e (hình 8). Giá trị năng lượng Urbach tính được là  $E_0=0,13$  eV.



Hình 8. Đồ thị chuyển đổi để tính giá trị  $E_0$  của màng mỏng vô định hình GST225

Tính toán được sử dụng tương tự cho màng mỏng GST225 ở trạng thái kết tinh. Kết quả tính được tổng hợp và thể hiện trong bảng 2.

Bảng 2. Giá trị các mức năng lượng của GST225 ở trạng thái vô định hình và kết tinh

Trạng thái vô định hình				Trạng thái kết tinh	
$E_g$ , eV		$E_0$ , eV		$E_g$ , eV	
Tính toán	Tham chiếu	Tính toán	Tham chiếu	Tính toán	Tham chiếu
0.610±0.001	0.7 [20] 0.63 [16], 0.8 [21], 0.74 [22]	0.130±0.001	0.072 [16], 0.05 [11]	0.400±0.001	0.5 [20] 0.40 [16], 0.41 [21], 0.5 [22]

Theo bảng 2, kết quả tính của tác giả trùng với kết quả nhiều bài viết nghiên cứu khác. Tuy nhiên, có một số giá trị chênh lệch nhau, đặc biệt giá trị mức năng lượng Urbach của GST225 ở trạng thái vô định hình. Điều này có thể được giải thích do kỹ thuật tạo màng mỏng của các bài nghiên cứu khác nhau, dẫn đến sự phân bố các phân tử của GST225 ở trạng thái vô định hình ít trật tự hơn. Nguồn gốc sự phụ thuộc mức năng lượng Urbach theo hàm  $e$ , đặc trưng cho chất bán dẫn vô định hình, được nhiều nhà vật lý nghiên cứu và giải thích. Ví dụ, Dou và Redfield trong các công bố của mình, đã đưa ra mô hình giải thích cho sự phụ thuộc trên là do sự nở rộng của các đường eksiton trong điện trường đều. Bản chất của Urbach tail cũng được giải thích dựa trên hiệu ứng Franz-Keldysh [23]. Trong khuôn khổ bài viết này, tác giả không đi sâu vào giải thích hiện tượng. Vấn đề đặt ra là, ngoài các phép đo và tính giá trị  $E_g$ ,  $E_0$ , việc sử dụng các quang phổ hấp thụ, phản xạ, truyền qua cũng có thể tính được các giá trị trên.

### 3 KẾT LUẬN

Hợp chất GST225 có hai trạng thái chính là vô định hình và kết tinh. Ở trạng thái kết tinh có cấu trúc mạng tinh thể dạng khối lập phương tâm diện  $fcc$  (kết tinh tại nhiệt độ 150°C). Các hệ số quang học ( $n$ ,  $k$ ,  $\alpha$ ) của GST225 phụ thuộc vào bước sóng ánh sáng. Có sự khác biệt lớn của các hệ số quang học này giữa hai trạng thái vô định hình và kết tinh. Sự khác biệt này được gọi là độ tương phản quang. Độ tương phản quang tính được trong thí nghiệm này dành cho hai bước sóng  $\lambda = 400$  nm là 0,18+ $i$ 3,34, và  $\lambda = 650$  nm là

2,86+ $i$ 2,13. Thông số rất quan trọng đối với chất bán dẫn GST225 là độ rộng vùng cấm ( $E_g$ ). Đối với GST225 độ rộng vùng cấm  $E_g$  từ 0,61 eV đến 0,64 eV ở trạng thái vô định hình và 0,4 eV ở trạng thái kết tinh. Kết quả tính toán tương tự cho màng mỏng trên đế Si cũng như thủy tinh K8.

Mô hình màng mỏng với hai lớp: lớp GST225 và lớp một hệ hỗn hợp bao gồm GST225 (95%) và không khí (5%) thích hợp dùng để mô phỏng và tính toán các hệ số quang dựa trên phổ ellipsometry đo được. Bên cạnh đó, sử dụng quang phổ hấp thụ, các giá trị năng lượng vùng cấm và năng lượng Urbach cũng được tính toán. Điều này thể hiện sự đa dạng trong cách tiến hành thí nghiệm, song song với các cách tính truyền thống, dựa trên sự phụ thuộc của cường độ dòng điện theo nhiệt độ.

Một hướng phát triển của việc nghiên cứu và ứng dụng GST225 vào trong kỹ thuật là thêm một số nguyên tố đồng vị (Bi, In, Sn hay Zn) với một trong các nguyên tố chính của GST225. Mục đích thêm các nguyên tố đồng vị vào nhằm làm tốt hơn các hằng số phản quang, để thông tin có thể được lưu trữ trong một thời gian dài hơn, quá trình đọc thông tin không xảy ra sự thay đổi trạng thái và thời gian chuyển đổi giữa các trạng thái nhanh hơn.

## TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] N. Yamada, E. Ohno, K. Nishiuchi, et al. Rapid phase transitions of GeTe-Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> pseudobinary amorphous thin films for an optical disk memory / J. Appl. Phys. – 1991. – Vol. 69. – P. 2849.
- [2] M. Wuttig and N. Yamada. Phase-change materials for rewriteable data storage / Nat. Mater. – 2007. V. 6. – P. 824.
- [3] A. V. Kolobov, J. Tominaga, P. Fons, and T. Uruga, Appl. Phys. Lett. 82, 382 (2003).
- [4] N. Yamada and T. Matsunaga, J. Appl. Phys. 88, 7020 (2000).
- [5] S. Privitera, E. Rimini, C. Bongiorno, R. Zonca, A. Pirovano, and R. Bez, J. Appl. Phys. 94, 4409 (2003).
- [6] A. V. Kolobov, P. Fons, J. Tominaga, A. I. Frenkel, A. L. Ankudinov, S. N. Yannopoulos, K. S. Andrikopoulos, and T. Uruga, Jpn. J. Appl. Phys. 44 (5b), 3345 (2005).
- [7] A. V. Kolobov, P. Fons, A. I. Frenkel, A. L. Ankudinov, J. Tominaga, and T. Uruga, Nature Mater. 3, 703 (2004).
- [8] M. Krbal, A. V. Kolobov, P. Fons, J. Tominaga, S. R. Elliott, J. Hegedus, Phys. Rev. B 83, 054203 (2011).
- [9] N. Yamada, E. Ohno, K. Nishiuchi, et al. Rapid phase transitions of GeTe-Sb<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> pseudobinary amorphous thin films for an optical disk memory / J. Appl. Phys. – 1991. – Vol. 69. – P. 2849.
- [10] N. Yamada, T. Matsunaga. Structure of laser-crystallized Ge<sub>2</sub>Sb<sub>2+x</sub>Te<sub>5</sub> sputtered thin films for use in optical memory / J. Appl. Phys. – 2000. – Vol. 88. – P. 7020.
- [11] R. De Bastiani, E. Carria, S. Gibilisco, et al. Crystallization of ion amorphized Ge<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>Te<sub>5</sub> thin films in presence of cubic or hexagonal phase / J. Appl. Phys. – 2010. – V. 107. – P. 113521.
- [12] B. Liu, Z. T. Song, T. Zhang, et al. Raman spectra and XPS studies of phase changes in Ge<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>Te<sub>5</sub> films / Chin. Phys. – 2004. – V. 13. – P. 1947.
- [13] Strand, D. Optical Routers Based on Ovonic Phase Change Materials / European Phase Change and Ovonic Science Symposium (Grenoble, France, 2006).
- [14] A. R. Forouhi and I. Bloomer. Optical properties of crystalline semiconductors and dielectrics / Phys. Rev. B. – 1988. – V. 38. – P. 1865.
- [15] Н. Мотт, Э. Дэвид. Электронные процессы в некристаллических веществах / М, Мир - 1971.
- [16] P. Němec, J. Příkryl, V. Nazabal, and M. Frumar. Optical characteristics of pulsed laser deposited Ge–Sb–Te thin films studied by spectroscopic ellipsometry / J. Appl. Phys. – 2011. – V. 109. – P. 073520.



- [17] P. Lazarenko, Huy Phuc Nguyen, S. Kozyukhin, A. Sherchenkov. Influence of Bi doping on electrical and optical properties of phase change material  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  / Journal of Optoelectronics and Advanced Materials. – 2011. – Vol. 13. – No.11-12. – Pp. 1400-1404.
- [18] E. G. Birgin, I. Chambouleyron, and J. M. Martínez. Estimation of optical constants of thin films using unconstrained optimization / J. Comput. Phys. – 1999. –V.151. – P. 862.
- [19] Tauc, J. The optical properties of solids / Ed. F. Abeles, North Holland, Amsterdam, 1970.
- [20] B.-S. Lee, J.R. Abelson, S.G. Bishop, et al. Investigation of the optical and electronic properties of  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  phase change material in its amorphous, cubic, and hexagonal phases / J. Appl. Phys. -2005. –V. 97. –P. 093509.
- [21] J. W. Park, S. H. Eom, H. Lee, et al. Optical properties of pseudobinary  $\text{GeTe}$ ,  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$ ,  $\text{GeSb}_2\text{Te}_4$ ,  $\text{GeSb}_4\text{Te}_7$ , and  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$  from ellipsometry and density functional theory / Phys. Rev. B. -2009. –V. 80. –P. 115209.
- [22] T. Kato, K. Tanaka. Electronic properties of amorphous and crystalline  $\text{Ge}_2\text{Sb}_2\text{Te}_5$  films / Jpn. J. Appl. Phys. – 2005. – V. 44. – P. 7340.
- [23] J. Feileib, S. Iwasa, S.C. Moss, et al. Reversible optical effects in amorphous semiconductors / J. Non-Crystalline Solids. - 1972. - V. 8-10. - P.909-916.

*Ngày nhận bài: 22/03/2019*

*Ngày chấp nhận đăng: 12/06/2019*