УДК 621.315.592

СТАТИСТИКА ЕЛЕКТРОНІВ І ДІРОК В СЕЛЕНИСТОМУ СВИНЦІ З ДОМІШКОВИМИ АТОМАМИ

Я.С. Буджак
Доктор фізико-математичних наук, професор*

О.В. Зуб
Аспірантка*
E-mail: oliazub@gmail.com
*Кафедра напівпровідникової електроніки
Національний університет «Львівська політехніка»
вул. С.Бандери, 12, м. Львів, 79013

В роботі показано вплив ефекту екранування домішковими атомами носіїв струму на форму рівняння нейтральності домішкових атомів PbSe. В досліджуваних кристалах були виявлені домішкові центри з глибокими енергетичними рівнями та обґрунтована природа таких локальних центрів

Ключові слова: рівняння нейтральності, концентрація носіїв струму

В работе показано влияние эффекта экранирования примесными атомами носителей тока на форму уравнения нейтральности примесных атомов PbSe. В исследуемых кристаллах были обнаружены примесные центры с глубокими энергетическими уровнями и обоснована природа таких локальных центров

Ключевые слова: уравнения нейтральности, концентрация носителей тока

The present paper deals the influence of effect shielding of impurity atoms charge carriers on the form of neutral equation of impurity atoms in PbSe. Shown that the crystals were investigated impurity centers with deep energy levels and found their nature of such centers

Key words: neutral equation, concentration of charge carriers

1. Вступ

В твердотілій електроніці дуже часто для прогнозування виробництва приладів із заданими параметрами необхідно знати концентрації домішкових атомів донорного і акцепторного типу та їх енергій активації. Без цих характеристичних даних напівпровідникових матеріалів їх прагматичне застосування малоперспективне.

В даній роботі досліджувались кристали селенистого свинцю, синтезовані із вихідних матеріалів Pb і Se без точних сертифікатів, які давали можливість одержувати зразки з неконтрольованими донорними або акцепторними домішками з концентраціями 10^{18}см$^{-3}$. На таких зразках в інтервалі температури (100-400) К досліджувалась низка кінетичних властивостей кристала.

2. Елементи теорії

В монокристалах селенистого свинцю близьких до стехіометричного складу, як правило, спостерігаються донорні або акцепторні домішки з концентрацією 10^{18}см$^{-3}$. В таких кристалах домішкові атоми свинцю утворюють мілкі донорні енергетичні рівні з енергією активації E_d, а домішкові атоми селена утворюють мілкі акцепторні рівні з енергією активації E_a. Енергії активації таких домішків описується такою формулою:

$$E_{d,a} = \frac{I_0 \cdot m^*_{n,p}}{\chi^2 \cdot m_0} = \frac{13.52 \cdot m^*_{n,p}}{\chi^2 \cdot m_0} \text{ eB}, \quad (1)$$

де I_0 - енергія іонізації атома водню, χ - діелектрична стала кристала, m^* - ефективна маса носіїв зарядів.

В селенистому свинці діелектрична постійна χ має дуже велике значення ($\chi = 250$). Тому згідно формули (1) маємо:

$$E_{d,a} = 2.16 \cdot 10^{-4} \cdot \frac{m^*_{n,p}}{m_0} \text{ eB} \quad (2)$$

В зв'язку з цим в кристалах селенистого свинцю виникає сильний ефект екранування домішкових атомів носіями струму [1–4]. Внаслідок впливу ефекту екранування енергія активації відповідних домішок залежить від температури і від концентрації електронного газу в кристалі:

$$E_{d,a} = E_{d,at} \cdot F(x,y), \quad (3)$$

де $F(x,y)$ - функція екранування , y - параметр екранування.

Це приводить до того, що для цих кристалів виконується наступна умова:

$$y = \frac{1}{a_0 e}\sqrt{\frac{kT}{\pi\chi}}\left(\frac{m^*}{m_e}\right)\left(\frac{\partial n(\mu^*,T)}{\partial\mu^*}\right)^{-1/2} < 2 \qquad (4)$$

В цьому відношенні a_0 – радіус борівської орбіти атома водню, e –величина заряду електрона, а всі інші позначення – загально відомі.

В результаті екранування ($y<2, F(x,y)<0$) кулонівський потенціал $V(\vec{r})$ домішкових атомів перетворюється в короткодіючий потенціал зі сферою дії радіусом r_0:

$$V(\vec{r}) = \frac{e}{\chi}\cdot\frac{\exp\left(-\frac{|\vec{r}|}{r_0}\right)}{|\vec{r}|} \qquad (5)$$

Однак цей потенціал діє в області радіусом r_0, як тільки валентний електрон виходить за сферу дії цього атома , він делокалізується , тобто в цій області потенціал вже не діє, а енергія активації атомів прямує до нуля.

В селенистому свинці легованому однотипними донорами і акцепторами з концентрацією 10^{18}см$^{-3}$ виконується умова (4). Із теорії відомо, що коли виконується ця умова, то всі домішкові атоми в кристалі з мілкими енергетичними рівнями іонізовані. Отже, у відсутності власних переходів в таких кристалах концентрація носіїв струму є постійною величиною, а рівняння нейтральності для таких домішкових кристалів n і p-типу провідності мають такий вигляд:

$$n(\mu^*(T),T) = N_d - N_a \qquad (6)$$

$$p(\mu_p^*(T),T) = N_a - N_d \qquad (7)$$

В цих рівняннях $n(\mu^*(T),T)$ і $p(\mu_p^*(T),T)$ - концентрації електронів і дірок, а N_d і N_a - концентрації домішкових донорів і акцепторів з мілкими домішковими рівнями в кристалі, а $(N_d - N_a)$ - концентрація некомпенсованих донорів, $(N_a - N_d)$ - концентрація некомпенсованих акцепторів.

В даній роботі досліджувались кристали селенистого свинцю, з неконтрольованими донорними або акцепторними домішками з концентраціями 10^{18}см$^{-3}$. На таких зразках в інтервалі температури (100-400) К досліджувалась низка кінетичних властивостей кристала. Ці вимірювання показали, що в досліджуваних кристалах в даному інтервалі температури концентрація носіїв струму збільшується в два рази (рис. 1).

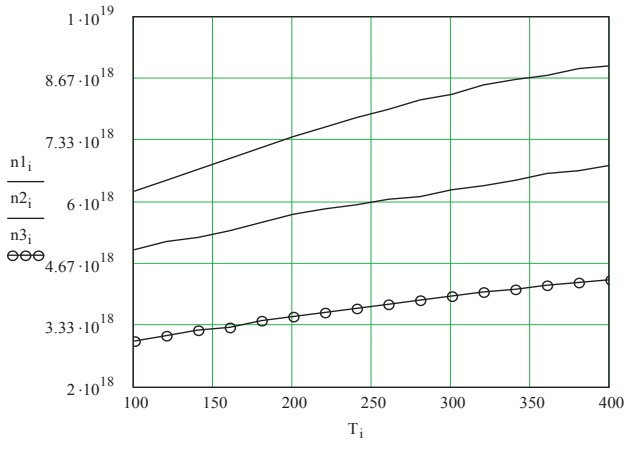

Рис. 1. Залежність концентрації носіїв струму від температури

Це означає, що в досліджуваних кристалах крім домішків з мілкими енергетичними рівнями енергії активації існують домішки з глибшими рівнями.

Тому в рівняння нейтральності (6) і (7) треба ввести додатково домішки з глибокими рівнями, і тоді згідно з статистичною теорією локальних енергетичних рівнів ці рівняння матимуть наступний вид:

$$n(\mu^*(T),T) = (N_d - N_a) + \frac{N_{gd}}{1+2\exp\left(\frac{E_{gd}}{kT}+\mu^*(T)\right)} \qquad (8)$$

$$p(\mu_p^*(T),T) = (N_a - N_d) + \frac{N_{ga}}{1+0.5\exp\left(\frac{E_{ga}}{kT}+\mu^*(T)\right)} \qquad (9)$$

В цих рівняннях N_{gd} і N_{ga} - концентрації донорів і акцепторів з глибокими енергетичними рівнями, а E_{gd} і E_{ga} - енергії активації глибоких донорів і акцепторів.

В рівняннях (8) і (9):

$(N_d - N_a), N_{gd}, E_{gd}, (N_a - N_d), N_{ga}, E_{ga}$ - це невідомі параметри кристала, які необхідно визначити за допомогою експериментальних значень таких величин: $n(\mu^*(T),T), \mu^*(T), p(\mu_p^*(T),T), \mu_p^*(T)$ виміряних при різних температурах кристала $T_1 \langle T_2 \langle T_3$.

З цією метою розпишемо тепер рівняння (8) при цих заданих температурах і тоді для визначення перших трьох невідомих параметрів для зразка n-типу провідності ми одержимо такі три нелінійні алгебричні рівняння:

$$n(\mu^*(T_1),T_1) = (N_d - N_a) + \frac{N_{gd}}{1+2\exp\left(\frac{E_{gd}}{kT_1}+\mu^*(T_1)\right)} \qquad (8.1)$$

$$n(\mu^*(T_2),T_2) = (N_d - N_a) + \frac{N_{gd}}{1+2\exp\left(\frac{E_{gd}}{kT_2}+\mu^*(T_2)\right)} \qquad (8.2)$$

$$n(\mu^*(T_3),T_3) = (N_d - N_a) + \frac{N_{gd}}{1+2\exp\left(\frac{E_{gd}}{kT_3}+\mu^*(T_3)\right)} \qquad (8.3)$$

Аналогічно одержимо три нелінійні рівняння для визначення невідомих параметрів для зразків p-типу провідності:

$$p(\mu_p^*(T_1),T_1) = (N_a - N_d) + \frac{N_{ga}}{1+0.5\exp\left(\frac{E_{ga}}{kT_1}+\mu_p^*(T_1)\right)} \qquad (9.1)$$

$$p(\mu_p^*(T_2),T_2) = (N_a - N_d) + \frac{N_{ga}}{1+0.5\exp\left(\frac{E_{ga}}{kT_2}+\mu_p^*(T_2)\right)} \qquad (9.2)$$

$$p(\mu_p^*(T_3),T_3) = (N_a - N_d) + \frac{N_{ga}}{1+0.5\exp\left(\frac{E_{ga}}{kT_3}+\mu_p^*(T_3)\right)} \qquad (9.3)$$

В цих рівняннях концентрації носіїв струму $n(\mu^*(T_i),T_i)$, $p(\mu_p^*(T_i),T_i)$ та їх хімічні потенціали $\mu^*(T_i)$, $\mu_p^*(T_i)$ - це експериментальні дані, визначені за допомогою коефіцієнтів Холла $R(T_i)$ та коефіцієнтів ефекту Зеєбека $\alpha(T_i)$.

Рівняння (8.1-8.3) та (9.1-9.3) в комп'ютерному середовищі MathCAD розв'язуються за допомогою так званих вичислювальних блоків Given/Find, Given/Minerr.

За допомогою рівнянь (8) і (9) були розраховані всі невідомі параметри досліджуваних кристалів.

3. Висновки

В результаті розрахунків було показано, що для двох зразків n – типу провідності - $(N_d - N_a) \approx 5.5 \cdot 10^{18}$ і $(N_d - N_a) \approx 2.6 \cdot 10^{18}$ cm^{-3}, а для зразка p-типу провідності - $(N_a - N_d) \approx 4.5 \cdot 10^{18}$. Концентрації донорів і акцепторів з глибокими енергетичними рівнями $N_{gd}, N_{ga} \approx 10^{18}$ cm^{-3}, а їх енергія активації E_{gd}, $E_{ga} \approx 0.012$ еВ.

Наявність донорів і акцепторів з глибокими енергетичними рівнями в селенистому свинці приводить до слабкого збільшення концентрації носіїв струму з підвищенням температури в досліджуваних кристалах майже в два рази.

Що ж до природи глибоких домішкових центрів, то це аналогічно, як спостерігається в Ge і Si, можуть бути комплекси вакансій кристалічної гратки з міжвузельними неконтрольованими домішковими атомами, які вносяться в кристал несертифікованими Pb і Se.

Література

1. Я.С. Буджак, М.П. Заячковский. К вопросу о механизме рассеяния носителей тока в PbSe.// УФЖ т.13,№11, 1968.с.1798-1804.
2. Я.С.Буджак. Екранування домішкових атомів носіями струму та його вплив на властивості кристалів // Фізика і хімія твердого тіла. Т.5.№1.2004.С.77-81.
3. Я.С.Буджак. Екранування в легованих кристалах // Вісник Національного університету "Львівська політехніка".-«Електроніка».- 2004.- №513. С.112-117.
4. Я.С.Буджак, І.Є. Лопатинський. MathCAD в теорії термодинамічних та кінетичних властивостей кристалів. Львів. Видавництво Національного університету "Львівська політехніка".2002. с.187.

Розглядаються варіанти застосувань дисперсної діагностики при інжекційному синтезі композитних функціональних матеріалів: до вихідних порошків, до дисперсної фази двофазного струменя, до оксидних включень на поверхні і в об'ємі композитних структур

Ключові слова: мікрочастинка, двофазний струмінь, композит

Рассматриваются варианты применений дисперсной диагностики при инжекционном синтезе композитных функциональных материалов: к исходным порошкам, к дисперсной фазе двухфазной струи, к оксидным включениям на поверхности и в объеме композитных структур

Ключевые слова: микрочастица, двухфазный поток, композит

We are considering variants of the following applications of disperse diagnostics at the injection synthesis of composite functional materials: to original powders, to dispersed phase of a two-phase jet, to oxide inclusions on the surface and in the volume of composite structures

Key words: microparticle, two-phase flow, composite

УДК 620.18:621.793:53.082.5:681.5

ЗАСТОСУВАННЯ ДИСПЕРСНОЇ ДІАГНОСТИКИ ПРИ ІНЖЕКЦІЙНОМУ СИНТЕЗІ КОМПОЗИТНИХ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ МАТЕРІАЛІВ

О.І. Денисенко
Кандидат технічних наук, доцент
Кафедра фізики
Національна металургійна академія України
пр. Гагаріна, 4, м. Дніпропетровськ, Україна, 49600
Контактний тел.: 099-044-53-92
E-mail: adenysenko@mail.ru

1. Вступ і аналіз публікацій

Технологічні процеси із використанням дисперсних систем характеризуються неповнотою априорної інформації [1,2], у першу чергу, про дисперсний склад, а також значним запізнюванням у каналах управління, що приводить до погіршення якості одержуваних виробів. Найбільш повною характеристикою дисперсного складу є функція розподілу по розмірним параметрам, наприклад, еквівалентним діаметрам, що дозво-