

**ХІМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ЯК ВАЖЛИВА ХАРАКТЕРИСТИКА
В АНАЛІЗАХ КІНЕТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ КРИСТАЛІВ***Ó Буджак Я.С., Зуб О.В., 2009*

Ya.S. Budzhak, O.V. Zub

**CHEMICAL POTENTIAL AS A CRUCIAL CHARACTERISTIC
IN ANALYSES OF KINETIC PROPERTIES OF CRYSTALS***Ó Budzhak Ya.S., Zub O.V., 2009*

Представлено аналітичну формулу залежності хімічного потенціалу від концентрацій донорної і акцепторної домішок та енергії іонізації донора, яка справедлива в області слабкого виродження носіїв заряду. Запропоновано метод визначення концентрацій донорної і акцепторної домішок та енергії іонізації донора з експериментальних температурних залежностей коефіцієнта термо-ЕРС.

The analytical formula of chemical potential dependence from donor and acceptor concentrations and donor ionization energy is presented. This formula is valid in the region of weak charge carrier degeneration. The method of determination of donor and acceptor concentrations and donor ionization energy from experimental temperature dependences of thermo –e.m.f. coefficient is proposed.

Вступ

У твердотілій електроніці дуже часто для прогнозування виробництва приладів із заданими параметрами необхідно знати концентрації домішкових атомів донорного і акцепторного типу N_D, N_A та їхні енергії активації E_D, E_A . Без цих характеристичних напівпровідникових матеріалів їх прагматичне застосування малоперспективне.

У зв'язку з цим в роботі обґрунтовується метод визначення концентрації легуючих домішкових атомів та їх енергії активації за температурними залежностями коефіцієнта термо-ЕРС.

Елементи теорії

Абсолютне значення коефіцієнта термоЕРС напівпровідникових кристалів в домішковій області провідності у відсутності власних електронних переходів описується такою формулою [1]:

$$a(m^*, T) = \left(\frac{k}{e} \right) \cdot \left[\frac{\int_0^{\infty} \left(\frac{e}{kT} \right) u(e) G(e) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial e} \right) de}{\int_0^{\infty} u(e) G(e) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial e} \right) de} - m^* \right], \quad (1)$$

де k – стала Больцмана; e – величина заряду електрона; $u(e)$ – функція розсіювання (неусереднена мікроскопічна рухливість носія заряду):

$$G(e) = \int_0^e g(e) de,$$

де $g(e)$ – густина енергетичних рівнів у дозволеній зоні енергії; h – стала Планка; $f_0 = \left[\exp\left(\frac{e}{kT} - m^*\right) + 1 \right]^{-1}$ – функція Ферм-Дірака; T – температура кристала; $m^* = \frac{m}{kT}$ – приведений хімічний потенціал.

Отже, згідно з формулою (1), коефіцієнт термоЕРС є монотонна функція хімічного потенціалу m^* , яка монотонно зменшується з його зростанням.

Хімічний потенціал m^* є одним із алгебричних коренів відомого нелінійного рівняння нейтральності для кристала.

Для кристалів n -типу провідності, легованих однотипними донорами і акцепторами з відповідними концентраціями N_D, N_A , в інтервалі температури, в якому відсутні власні переходи або ними можна знехтувати, рівняння нейтральності має такий вигляд:

$$L(m^*, T) = n(m^*, T) - \frac{N_D}{1 + 2 \exp(E_D^* + m^*)} + N_A = 0, \quad (3)$$

де $E_D^* = \frac{E_D}{kT}$, E_D – енергія іонізації атомів донорної домішки, а концентрація електронного газу описується такою формулою:

$$n(m^*, T) = \int_0^{\infty} G(e)^3 \left(-\frac{df_0}{de} \right) de. \quad (4)$$

Загальний аналіз нелінійного рівняння (3) стосовно хімічного потенціалу m^* показує, що воно завжди має розв'язок, хоч не завжди цей розв'язок можна записати в аналітичній формі. Крім того, такий аналіз показує, що температурна залежність хімічного потенціалу m^* як кореня рівняння (3) за деякої температури T_e , має максимум m_e^* . Значення m_e^* та температура T_e , за якої хімічний потенціал $m^*(T)$ досягає свого максимального значення, визначаються із такої системи рівнянь:

$$\begin{cases} L(m^*, T) = 0 \\ \frac{dL(m^*, T)}{dT} = 0 \end{cases}. \quad (5)$$

Аналіз цієї системи рівнянь показує, що вона завжди має розв'язок для напівпровідникових кристалів, в яких існують активаційні електронні переходи, а її корені мають значення m_e^* та T_e .

У [2, 3] показано, що коли хімічний потенціал електронів відповідає умові

$$-\infty \leq m^* \leq 1.2, \quad (6)$$

то корінь рівняння (3) має аналітичний розв'язок і описується він з точністю до 3 % такою аналітичною формулою:

$$\begin{aligned} m^*(N_D, N_A, E_D, T) &= \ln \left(\frac{Y(N_D, N_A, E_D, T)}{Z_n(T)} \right), \quad Z_n(T) = \int_0^{\infty} g_n(e) \exp\left(-\frac{e}{kT}\right) de; \quad (7) \\ Y(N_D, N_A, E_D, T) &= \frac{|p(N_D, N_A, E_D, T)|}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4 \cdot q(N_D, N_A, E_D, T)}{p(N_D, N_A, E_D, T)^2} - \frac{p(N_D, N_A, E_D, T)}{|p(N_D, N_A, E_D, T)|}} \right); \\ q(N_D, N_A, E_D, T) &= \frac{n_D(E_D, T) \cdot (N_D - N_A)}{2 \cdot \left(1 + \frac{N_A}{Z_n(T)} \cdot C\right)}, \quad n_D(E_D, T) = Z_n(T) \cdot \exp\left(-\frac{E_D}{kT}\right); \end{aligned}$$

$$p(N_D, N_A, E_D, T) = \frac{n_D(E_D, T)}{2 \cdot \left(1 + \frac{N_A}{Z_n(T)} \cdot C\right)} \cdot \left(1 + \frac{2 \cdot N_A}{n_D(E_D, T)} - \frac{N_D - N_A}{Z_n(T)} \cdot C\right),$$

де $C=0,27$.

Рівняння (3) в середовищі MathCAD має точний числовий розв'язок. Цей розв'язок за допомогою root-функції трьох аргументів описується таким розрахунковим алгоритмом:

$$m_i^* = \text{root}(L(m^*, T_i), m_{\min}^*, m_{\max}^*), \quad (8)$$

де m_{\min}^*, m_{\max}^* – можливі мінімальне та максимальне значення приведенного хімічного потенціалу в досліджуваному інтервалі температури.

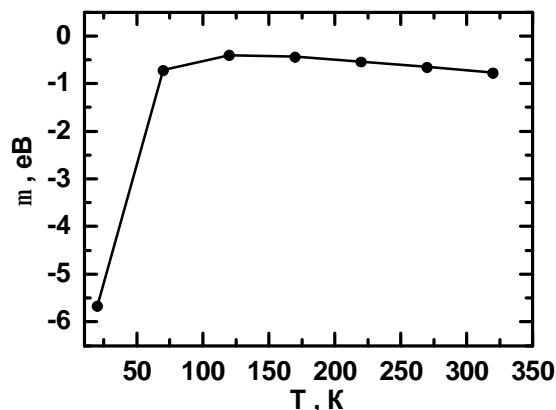
Розглянемо тепер для прикладу типовий модельний кристал з параболічним законом дисперсії і такими характеристичними параметрами: $N_D = 3.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_A = 2.5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, $E_D = 0.013$, $m_n^* = 0.22 \cdot m$, де m – маса електрона.

Складемо для цього кристала рівняння нейтральності (3) і визначатимемо його корені m_i^* за різних температур T_i за точною формулою (8) і m^* за наближеною формулою (7). Результати цих розрахунків показано на рис. 1, з якого бачимо, що результати розрахунків за формулами (7) і (8) майже ідентичні, а їх екстремальні значення збігаються. Це означає, що формула (7) за умови (2) доволі точна і її можна використовувати для практичних розрахунків для аналізу різних експериментальних даних властивостей напівпровідникових кристалів.

Згідно з формулою (1) коефіцієнт термоЕРС є функцією хімічного потенціалу m^* . Але за формулою (7) хімічний потенціал m^* є складною функцією внутрішніх параметрів кристалічної ґратки N_D, N_A, E_D та температури кристала T . Тому маємо

$$a = a(m^*(N_D, N_A, E_D, T), T). \quad (9)$$

Права частина цього рівняння описується правою частиною формули (1), в яку вставлений приведенний хімічний потенціал як функція параметрів кристала (рисунок).



Залежність хімічного потенціалу від температури.
Суцільна лінія – розрахунок за формулою (8); точки – за формулою (7)

Отже, якщо за температур кристала $T_1 < T_2 < T_3$ його експериментально виміряний коефіцієнт термоЕРС має відповідно значення a_1, a_2, a_3 , то за цими даними маємо систему трьох нелінійних алгебричних рівнянь для визначення невідомих параметрів кристала N_D, N_A, E_D :

$$\begin{aligned}
 a_1 &= a(N_D, N_A, E_D, T_1), \\
 a_2 &= a(N_D, N_A, E_D, T_2), \\
 a_3 &= a(N_D, N_A, E_D, T_3).
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

Ця система рівнянь в середовищі MathCAD розв'язується за допомогою вчислювальних блоків Given/Find(N_D, N_A, E_D) або Given/Minerr(N_D, N_A, E_D).

Практичне використання описаного методу визначення параметрів N_D, N_A, E_D показує, що він надійний в розрахунках і видає результати доволі високої точності [4].

Висновки

Показано, що для невідроджених або слабковідроджених електронів приведений хімічний потенціал, який відповідає умові $-\infty \leq m^* + 1.2$, описується аналітичною формулою (7), яка дає можливість за експериментальними вимірюваннями коефіцієнта термоЕРС визначати домішкові параметри напівпровідникових кристалів.

Наявність в температурній залежності приведенного хімічного потенціалу значення m_e^* свідчить, що в домішковому кристалі існують активаційні електронні переходи, характерні для напівпровідникових кристалів.

1. Буджак Я.С. До питання про легування напівпровідникових кристалів з максимальною термоелектричною ефективністю // Термоелектрика. – 2007. – № 4. – С. 41–46. 2. Буджак Я.С., Дружинін А.О., Ховерко Ю.М. Провідність легованих ниткоподібних кристалів кремнію та її аналіз в інтервалі температур 4,2–300 К // Міжрегіонал. наук. семінар “Сучасні проблеми електроніки”: Тез. доп., 31–1 лютого 2008. – Львів: Вид. центр Львів. нац. ун-ту імені Івана Франка, 2008. 3. Буджак Я.С., Дружинін А.О., Островський І.П., Матвієнко С.М. Перенос носіїв заряду в легованих ниткоподібних кристалах твердих розчинів Si-Ge // Фізика і хімія твердого тіла. – 2006. – Т. 7, № 2. – С. 212–216. 4. Буджак Я.С. Коефіцієнт ефекту Зеєбека як індикатор важливих характеристик домішкових напівпровідникових кристалів // Вісн. Нац. ун-ту “Львівська політехніка”. – 2006. – № 569: Елементи теорії та прилади твердотілої електроніки. – С. 7–11.