

ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ТА ТЕОРЕТИЧНІ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ ПРОЦЕСІВ

УДК 621

М.М. Баран, Р.М. Пелешак, Б.А. Лукіянець*

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,

*Національний університет “Львівська політехніка”,

кафедра фізики

ІЗОЕЛЕКТРОННО-КОНЦЕНТРАЦІЙНІ ЛІНІЇ НАВКОЛО КРАЙОВОЇ ДИСЛОКАЦІЇ

© Баран М.М., Пелешак Р.М., Лукіянець Б.А., 2002

M.M. Baran, R.M. Peleshchak, B.A. Lukiyanets

IZOELECTRON-CONCENTRATIONAL LINES AROUND EDGED DISLOCATION

Baran M.M., Peleshchak R.M., Lukiyanets B.A., 2002

У рамках зонної моделі з урахуванням електрон-деформаційної взаємодії розраховано ізоелектронно-концентраційні лінії навколо крайової дислокації залежно від ступеня заповнення зони провідності. Показано, що із зростанням ступеня заповнення зони провідності ізоконцентраційні лінії стискаються вздовж дислокаційної площини. А з наближенням до ядра дислокації ізоелектронно-концентраційним лініям відповідають більші густини заряду.

In frames of a zone model taking into account electron-deformation interaction, the izoelectronic-concentration lines are counted up around the edged dislocation depending on the filling in degree of conduction zone. There is shown that with the growth of filling in degree of conduction zone, the izoconcentration lines are squeezed along the dislocation square on. There is also shown that with the approaching to the nucleus of dislocation, more denses of charge refer to izoelectronic-concentration lines.

Вступ. Дослідження характеру заповнення електронних станів навколо крайової дислокації, самоузгоджено пов'язаного з деформацією ґратки залежно від ступеня заповнення зони провідності ($0 \leq \bar{n} < 2$), є актуальним з погляду:

1) вивчення механізму впливу ізоелектронно-концентраційної поверхні навколо крайової дислокації на дифузію домішок вздовж осі дислокації;

2) прогнозування впливу різних деградаційних ефектів на параметри опто- і наноелектронних приладів завдяки зміні внутрішніх локальних деформацій міжатомних зв'язків, які виникають внаслідок просторового перерозподілу електронної густини під дією електричного поля та світла;

3) побудови модифікованої моделі зміни руху дислокації під дією електричного поля та збудження світлом;

4) побудови модифікованої зонної моделі кристала з крайовою дислокацією на відміну від моделі [1];

5) встановлення закономірностей впливу ступеня заповнення зони провідності ($0 \leq n < 1$) на ізодеформаційні поверхні навколо крайової дислокації.

У більшості задач [2, 3] крайова дислокація моделюється у вигляді лінійної зарядженої нитки, а взаємодія між дислокацією і вільними електронами враховується тільки електростатична. Просторовий розподіл електронної густини в околі дислокацій описувався функцією вигляду Больцмана.

Метою даної роботи є розрахунок ізоелектронно-концентраційних ліній (тобто ліній навколо крайової дислокації з однаковим просторовим перерозподілом концентрації електронів $\Delta n(x, y) = const$) навколо крайової дислокації залежно від ступеня заповнення зони провідності методом самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку [4, 5]

Розрахунок ізоелектронно-концентраційних ліній навколо крайової дислокації. У задачі розглядається модель ізотропного кристала з крайовою дислокацією з віссю дислокації, напрямленою вздовж OZ, і вектором Бюргерса \vec{b} – вздовж OX, у якій стан електронів провідності описується орбітальноневиродженою зоною провідності завтошки $2\Delta_\lambda$. Деформація, зумовлена всебічним механічним напруженням, створеним дислокацією, може призводити до зміщення орбітальноневиродженої зони провідності.

Гамільтоніан пружнонеоднорідно деформованого кристала з дислокацією, який враховує цей ефект, має вигляд [6]

$$\hat{H} = \sum_{i\sigma} (W + SU(\vec{r}_i)) C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} + \sum_{ij} \lambda_{ij}^0 C_{i\sigma}^+ C_{i\sigma} + \frac{1}{2} \sum_i K \Omega_0 U^2(\vec{r}_i) + H_C. \quad (1)$$

Тут $C_{i\sigma}^+$ ($C_{i\sigma}$) – фермі-оператори народження (знищення) електрона зі спіном “ σ ” в локалізованому стані Ваньє “ i ”; W – положення середини електронної зони; λ_{ij}^0 – інтеграл електронного перекриття в недеформованій ґратці; S – описує зсув зони провідності при деформації; K – пружна стала;

$$U(\vec{r}_i) = Sp \hat{U}(\vec{r}_i) = \frac{\Omega(\vec{r}) - \Omega_0}{\Omega_0} \quad (2)$$

– параметр деформації, який описує відносну зміну об'єму елементарної комірки при наявності дислокації; зумовлену як механічною дією дислокації $U_{mech}(\vec{r})$, так і електрон-деформаційної складової ($U_{el-d}(\vec{r})$), що виникає внаслідок самоузгодженої взаємодії електронної підсистеми і деформації ґратки [7]; H_C – гамільтоніан кулонівської міжелектронної взаємодії. $U_{el-d}(\vec{r})$ – знаходиться з розв'язання самоузгодженої системи рівнянь [9]:

– стаціонарного рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1)

$$\left[\nabla_{\vec{r}}^2 - \frac{S}{\alpha^*} U(\vec{r}) + \frac{e}{\alpha^*} \phi(\vec{r}) \right] \Psi_n(\vec{r}) = -\frac{1}{\alpha^*} (\lambda_n - \lambda_0) \Psi_n(\vec{r}), \quad (3)$$

де $\alpha^* = \frac{\hbar^2}{2m^*}$; λ_n – власні значення енергії; λ_0 – енергія дна зони провідності недеформованої ґратки;

– умови механічної рівноваги

$$\left\langle \frac{\partial H}{\partial U} \right\rangle = \sigma_{mech}(\vec{r})V, \quad (4)$$

де $\sigma_{mech}(\vec{r})$ – механічне напруження, створене дислокацією, V – об'єм кристала; з якої визначається параметр сумарної деформації

$$U(\vec{r}) = U_{el-d}(\vec{r}) + U_{mech}(\vec{r}), \quad (5)$$

– рівняння, яке визначає положення хімічного потенціалу

$$\frac{\Omega_0}{V} \int_{V_r} n(\vec{r}) \partial \vec{r} = \bar{n}, \quad 0 < \bar{n} < 2, \quad (6)$$

– рівняння, яке визначає концентрацію носіїв, $n(\vec{r})$

$$n(\vec{r}) = \sum_n \frac{\psi_n^*(\vec{r})\psi_n(\vec{r})}{\exp[\beta(\lambda_n - \mu)] + 1}, \quad (7)$$

– рівняння Пуассона, яке визначає електростатичний потенціал $\varphi(\vec{r})$, зумовлений перерозподілом електронної густини $\Delta n(\vec{r}) (\Delta n(\vec{r}) = n(\vec{r}) - n_0)$ внаслідок локальної зміни зонного спектра при деформації

$$\nabla_{\vec{r}}^2 \varphi(\vec{r}) = -\frac{e}{\epsilon \epsilon_0} \Delta n(\vec{r}). \quad (8)$$

Під час розв'язання цієї самоузгодженої системи рівнянь розглядався випадок $e\varphi \sim SU_{mech}$, оскільки концентрація основних носіїв в кристалі $ZnSe$ може досягати концентрацій $n_0 \cong (10^{17} \div 10^{19}) \text{ см}^{-3}$ [10].

Розв'язавши систему рівнянь (3)–(8), отримаємо

$$U_{el-d}(\vec{r}) = -\frac{S}{K} \cdot \Delta n(\vec{r}), \quad (9)$$

де

$$\Delta n(\vec{r}) = -SR_S D \frac{y}{|\vec{r}|} \cdot \left[\frac{2}{r_0} I_1(gr_0) K_1(g\vec{r}) - \frac{1}{\rho} \right], \quad r \in [r_0, +\infty) \quad (10)$$

$D = \frac{1-2\nu}{1-\nu} \cdot b$; $r_0 = (2-3)b$ – радіус ядра дислокації; $I_1(gr_0)$, $K_1(gr)$ – функції Бесселя і

Макдональда першого роду порядку 1; $g^2 = \frac{e^2 R_S}{\epsilon_0}$; R_S – функція, яка залежить від параметрів n_0, S, K

$$R_S = \left(\frac{3}{8} \right)^{\frac{1}{3}} \cdot \frac{n_0^{\frac{1}{3}}}{\alpha^* \pi^{\frac{4}{3}}} \cdot \frac{\left[1 + cn_0^{\frac{1}{3}} \right]^{\frac{1}{2}}}{1 - \frac{3}{2} cn_0^{\frac{1}{3}} \cdot \left[1 + cn_0^{\frac{1}{3}} \right]^{\frac{1}{2}}}, \quad (11)$$

$$c = \frac{S^2}{(3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \cdot \alpha^* K} \quad (12)$$

Отже, електрон-деформаційна взаємодія призводить до перенормування вихідної механічної деформації $U_{mech}(\vec{r})$ складовою $U_{el-d}(\vec{r})$.

Як випливає з формули (5), в площині, яка є перпендикулярна до лінії дислокації вздовж останньої, внаслідок електрон-деформаційної взаємодії виникає знакозмінний перерозподіл зарядів $\Delta n(\vec{r})$ у вигляді електрон-деформаційного диполя з дипольним моментом \vec{P}_{el-d} [11].

Числові розрахунки і обговорення результатів. На рис. 1, 2 наведені числові результати обчислення ізоелектронно-концентраційних ліній навколо крайової дислокації для середніх концентрацій електронів провідності $n_{01} = 5,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (рис. 1, 2, 3) і $n_{02} = 5,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (рис. 4). Як видно з рис. 1, 2, 3, із збільшенням гідростатичної константи деформаційного потенціалу S та ефективної маси m^* ізоляції просторового перерозподілу концентрації електронів провідності Δn навколо крайової дислокації розтягуються сильніше вздовж дислокаційної площини, ніж у напрямку, перпендикулярному до цієї площини; а із зростанням ступеня заповнення зони провідності $\bar{n} = n_0 \cdot \Omega_0$ (рис. 4) та пружної сталої ізоляції просторового перерозподілу концентрації електронів провідності навпаки стискаються сильніше вздовж дислокаційної площини, ніж у напрямку, перпендикулярному до цієї площини. Зокрема із збільшенням S вдвічі ($S = 5 \text{ eV}$ для $ZnSe$) при $m_1^* = 0,17m_0$, $n_{01} = 5,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$,

$K = 0,379 \text{ eV}/A$ ізоляції заповнення електронних станів ($\Delta n(x, y) = const$ (рис. 1, 2)) навколо крайової дислокації видовжуються вздовж дислокаційної площини. Відносна зміна концентрації електронів ($\Delta n(x, y)/n_{01}$), що відповідає ізолініям: $\Delta n_1 = 5,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} - C_1$; $\Delta n_2 = 2,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - C_2$, – як для $S = 5 \text{ eV}$, так і для $S = 10 \text{ eV}$, відповідно, дорівнює 10, 50 % (рис. 1, 2, 3). З ростом константи деформаційного потенціалу S ($S = 5 \text{ eV}$ (рис. 1); $S = 10 \text{ eV}$ (рис. 2) центр мас ізоліній густини заряду $\Delta n_1 = 5,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} - C_1$; $\Delta n_2 = 2,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - C_2$ відповідно зміщується від ядра дислокації на $105 a$, $22 a$ (a – параметр ґратки).

Із збільшенням ефективної маси електрона $m_2^* \cong 3m_1^*$ при решті наведених вище параметрах центр мас ізоліній густини заряду $\Delta n_1 = 5,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} - C_1$; $\Delta n_2 = 2,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - C_2$ відповідно зміщується від ядра дислокації на $345 a$, $65 a$ (рис. 3).

Зокрема із збільшенням n_0 ($n_{02} = 5,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$) на порядок при $m_1^* = 0,17m_0$, $S = 5,4 \text{ eV}$, $K = 0,379 \text{ eV}/A$ ізоляції заповнення електронних станів ($\Delta n(x, y) = const$ (рис. 4)) навколо крайової дислокації видовжуються вздовж дислокаційної площини. Відносна зміна концентрації електронів ($\Delta n(x, y)/n_{02}$), що відповідає ізолініям: $\Delta n'_1 = 5,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - C'_1$; $\Delta n'_2 = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3} - C'_2$, відповідно дорівнює 10, 50 % (рис. 4). Із збільшенням середньої концентрації електронів провідності n_0 ($n_{01} = 5,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ і $n_{02} = 5,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ (рис. 4)) центр мас ізоліній густини заряду $\Delta n'_1 = 5,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - C'_1$; $\Delta n'_2 = 2,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3} - C'_2$, відповідно, зміщується до ядра дислокації на $104 a$, $22 a$.

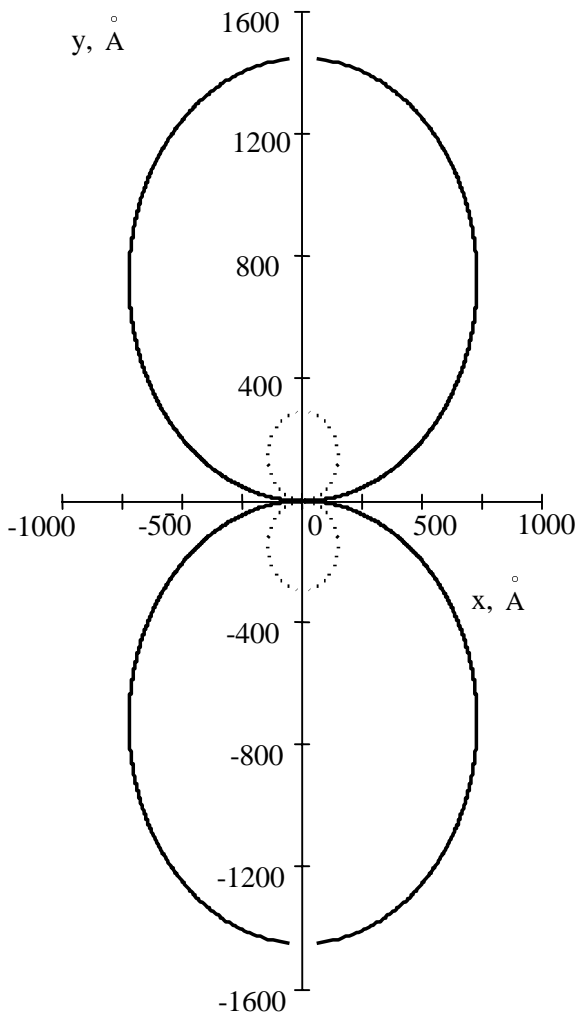


Рис. 1. Сімейство ізоелектронно-концентраційних ліній навколо крайової дислокації

для $m_1^* = 0,17m_0$, $n_{01} = 5,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$,

$$S = 5 \text{ eV}, K = 0,379 \text{ eV} / \text{Å}^3$$

$$(\Delta n_1 = 5,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} - C_1;$$

$$\Delta n_2 = 2,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - C_2);$$

————— $- C_1;$
 $- C_2$

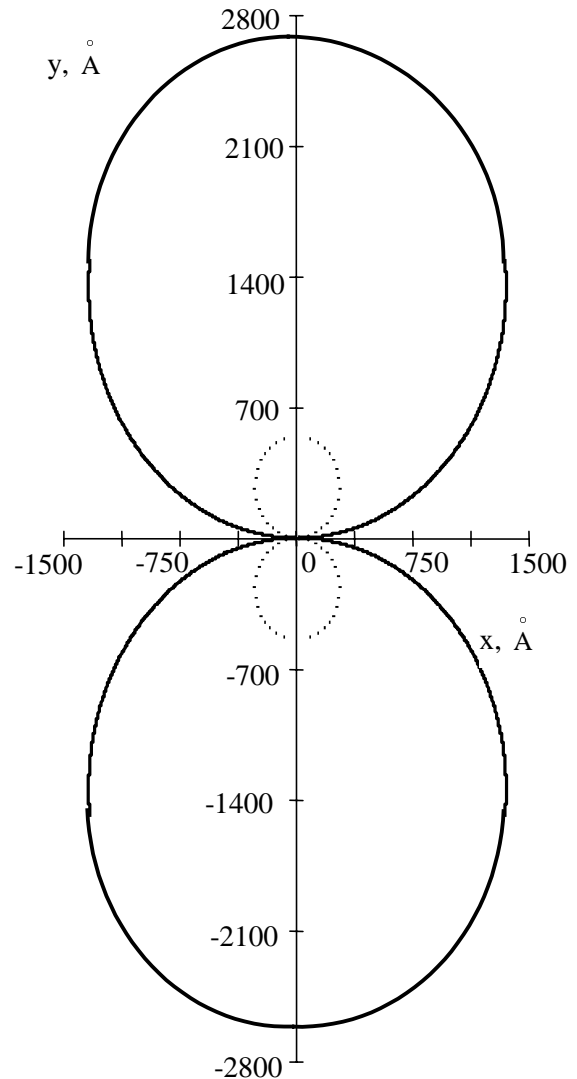


Рис. 2. Сімейство ізоелектронно-концентраційних ліній навколо крайової дислокації

для $m_1^* = 0,17m_0$, $n_{01} = 5,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$,

$$S = 10 \text{ eV}, K = 0,379 \text{ eV} / \text{Å}^3$$

$$(\Delta n_1 = 5,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} - C_1;$$

$$\Delta n_2 = 2,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - C_2).$$

————— $- C_1;$
 $- C_2$

З наведених результатів розрахунків ізоліній заповнення електронних станів навколо крайової дислокації можна зробити такі висновки:

1) із зростанням ступеня заповнення зони провідності ізолінії заповнення електронних станів навколо крайової дислокації стискаються вздовж дислокаційної площини, причому більший стиск спостерігається для ізоліній, яким відповідають менші електронні густини;

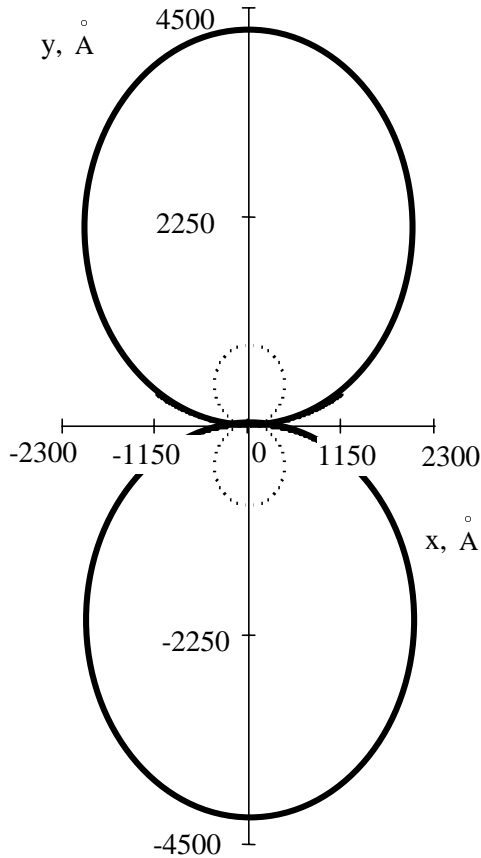


Рис. 3. Сімейство ізоелектронно-концентраційних ліній навколо крайової дислокації
для $m_1^* = 0,5m_0, n_{01} = 5,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$,

$$S = 5eB, K = 0,379eB / A$$

$$(\Delta n_1 = 5,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3} - C_1;$$

$$\Delta n_2 = 2,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - C_2).$$

————— — C_1 ;
 — C_2

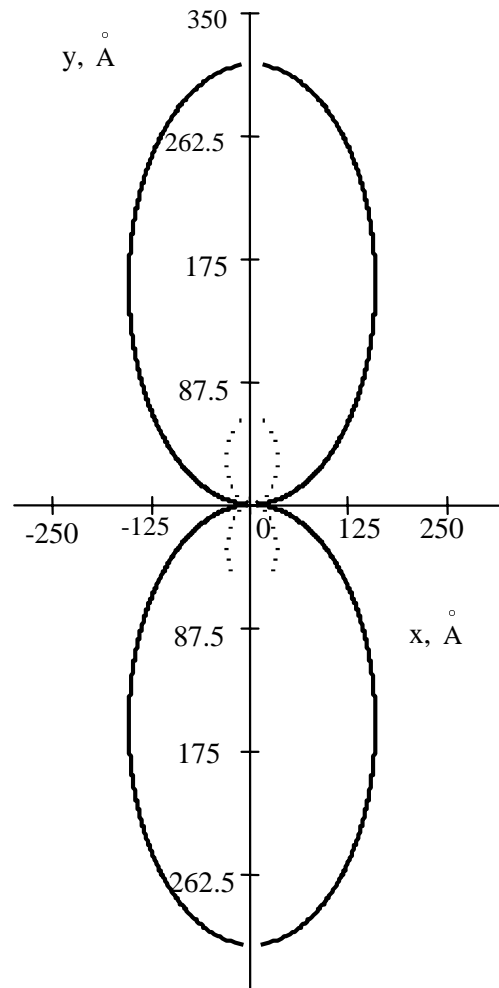


Рис. 4. Сімейство ізоелектронно-концентраційних ліній навколо крайової дислокації
для $m_1^* = 0,17m_0, n_{02} = 5,5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$,

$$S = 5eB, K = 0,379eB / A$$

$$(\Delta n_1' = 5,5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3} - C_1';$$

$$\Delta n_2 = 2,7 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3} - C_2').$$

————— — C_1'
 — C_2'

2) із зростанням гідростатичної константи деформаційного потенціалу, ефективної маси ізолінії заповнення електронних станів навколо крайової дислокації розтягуються вздовж дислокаційної площини від ядра дислокації сильніше, ніж у напрямку, перпендикулярному до цієї площини, причому із зростанням ефективної маси спостерігається сильніше видовження ізоліній, ніж із зростанням гідростатичної константи;

3) ізоелектронно-концентраційні лінії електрон-деформаційного потенціалу (формула (9)) з точністю до знака і постійного множника мають такий же характер, як і ізолінії заповнення електронних станів навколо крайової дислокації.

1. Судзуки Т., Есинага Х., Такнуги С. Динамика дислокацій и пластичность. – М., 1989.
2. Бонч-Бруевич В.Л., Гласко В.Б. // ФТТ. – 1961. – 3, В.1. – С. 36–46.
3. Шикин В.Б., Шикина Ю.В. // УФН. – 1995. – 165, № 8. – С. 888–905.
4. Стасюк І.В., Пелещак Р.М. // УФЖ. – 1991. – 36, В. 11. – С. 1744.
5. Пелещак Р.М., Лукіянець Б.А., Тупчак В.П. // ЖФД. – 2000. – 4. – С. 165–170.
6. Пелещак Р.М. Электронные состояния деформации решётки кристалла при наличии точечных дефектов // Препринт-69-53 ИТФ ФН УССР. – К., 1989. – 24 с.
7. Taguchi Tsunemasa, Kawakami Yoich , Yamada Yoichi // Physica B. – 1993. – 23. – P. 191–196.
8. Стасюк І.В., Пелещак Р.М. // УФЖ. – 1999. – 44, В. 8. – С. 856–860.
9. Peleschak R.M. // Condensed Matter Physics. – 2000. – 3. – P. 169.
10. Коваленко А.В. // ФТП. – 1997. – 31, В.1. – С. 11.
11. Пелещак Р.М., Лукіянець Б.А. // Письма в ЖТФ. – 1998. – 24, В. 3. – С. 32–38.

УДК 621.793.1

А.Б. Захарків, З.А. Шандра

Національний університет “Львівська політехніка”,
кафедра електронних приладів

ДОСЛІДЖЕННЯ КОЛИВАНЬ СТРУМУ ГАЗОВОГО РОЗРЯДУ В КОМІРЦІ ПЕННІНГА З СЕКЦІЙНИМ АНОДОМ

© Захарків А.Б., Шандра З.А., 2002

A.B. Zacharkiv, Z.A. Szandra

THE STUDY OF OSCILLATIONS GAS DISCHARGE CURENT IN PENNING'S CELL WITH SECTIONAL ANODE

© Zacharkiv A.B., Szandra Z.A., 2002

Подано результати досліджень коливань електричного струму в комірці Пеннінга з секційним анодом. Виявлено генерацію коливань частотою 2 МГц при подачі на секцію анода від'ємного потенціалу. Досліджено вплив потенціалу секції та розрядного струму на амплітуду коливань, пропонується механізм виникнення коливань.

This work is dedicated to studies of the oscillations of electric current in penning's cell with sectional anode. The oscillation generation with frequency 2 MHz at applying of negative potential on anode section is detected. The influence of section potential magnitude and discharge current on oscillation magnitude is studied and the mechanism for oscillation origin is proposed.

Вступ. Іонно-плазмова технологія має широке застосування в сучасному виробництві приладів електронної техніки, зокрема для нанесення тонких плівок, травлення, легування. Газовий розряд є ефективним джерелом заряджених частинок в установках еліонної оброб-