

ХІМІЧНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ЯК ВАЖЛИВА ХАРАКТЕРИСТИКА В АНАЛІЗАХ КІНЕТИЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛІВ

Буджак Я.С.

*Національний університет "Львівська політехніка",
79013 м. Львів, вул. С. Бандери, 12*

Багато кінетичних властивостей кристалів мають аналітичну залежність від приведенного хімічного потенціалу $\mu^* = \frac{\mu}{kT}$, де μ - хімічний потенціал носіїв струму в кристалі, k - постійна Больцмана, T - температура кристала. Цей потенціал є коренем рівняння нейтральності, яке в загальній формі можна записати в такому вигляді:

$$L(N_D, N_A, E_D, E_A, \mu^*, T) = 0, \quad (1)$$

де N_D, N_A - концентрації донорної та акцепторної домішки в кристалі, E_D, E_A - енергії активації відповідних домішкових атомів. Це рівняння немає загального аналітичного розв'язку для свого кореня μ^* .

В даній роботі аналітичний розв'язок рівняння (1) обґрунтований для кристалів в яких відсутні власні переходи, або ними можна нехтувати, а хімічний потенціал відповідає умові $-\infty < \mu^* \leq +1.2$. В зв'язку з цим маємо:

$$\mu^*(T) = \mu^*(N_D, N_A, E_D, E_A, T) \quad (2)$$

Тому, якщо деякий кінетичний коефіцієнт K кристала залежить від T і $\mu^*(T)$, то це означає що

$$K(T) = K(T, \mu^*(T)) = K(T, \mu^*(N_D, N_A, E_D, E_A, T)) \quad (3)$$

Права частина цього рівняння – це аналітична формула кінетичного коефіцієнта обґрунтованого кінетичною теорією

Визначивши цей коефіцієнт при температурах $T_1, T_2, \dots, T_n, \dots$, ми одержимо множину значень $K_1, K_2, \dots, K_n, \dots$, де $K_i = K(T_i)$. Ця множина дає можливість організувати таку систему чотирьох нелінійних алгебричних рівнянь:

$$K(T_1, \mu^*(N_D, N_A, E_D, E_A, T_1)) = K_1$$

.....

$$K(T_4, \mu^*(N_D, N_A, E_D, E_A, T_4)) = K_4 \quad (4)$$

Якщо в цій системі параметри кристала N_D, N_A, E_D, E_A невідомі, тому їх можна вважати її коренями.

Корені нелінійних алгебричних систем рівнянь в середовищі MathCAD легко визначають за допомогою розв'язувальних блоків Given/Find, або Given/Minerr. Застосування описаного методу для визначення параметрів кристала показало його велику ефективність.