

ПЛАЗМОВА МОДЕЛЬ ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МАТЕРІАЛІВ, ЩО УТРИМУЮТЬ ПІДСИСТЕМУ ЦИЛІНДРИЧНИХ НАНОВКЛЮЧЕНЬ В ОБ'ЄМІ

Маренков В.І.

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова,
65026-Одеса, вул. Дворянська, 2; e-mail: marenkov@ukr.net

Широке впровадження нанотехнологій у багатьох галузях сучасного промислового виробництва, з метою створення систем моніторингу та контролю (наносенсори, «розумні» електронні системи, тощо), висуває на чільне місце цілий ряд теоретичних проблем, пов'язаних з моделюванням електронних властивостей наноструктурованих матеріалів, які знаходять впровадження при розробці та виготовленні елементів електронних схем [1]. Інорідні включення (ІВ) у базовому матеріалі нано- та мезоскопічного масштабу змінюють його локальні електронні властивості не тільки в області контакту (поблизу поверхні ІВ), але й в об'ємі – при достатній загальній концентрації ІВ в матриці базового матеріалу (БМ). Розгляд і вирішення найбільш актуальної проблеми – визначення впливу електронних та діелектричних характеристик речовини ІВ та їх геометричних і концентраційних параметрів на ефективну локальну концентрацію носіїв в нанонеоднорідному матеріалі (ННМ) у рамках плазмової моделі «електронеутральных чарунок» [2-3] – окреслюють коло принципів питань досліджених у роботі.

При створенні нанонеоднорідних структур з метою контролю характеристик нановключень (розміру і концентрації) першочергового значення набувають методи експрес-діагностики та контролю параметрів множини імплантованих неоднорідностей в тілі базового матеріалу. Одним з перспективних напрямків є використання методу, заснованого на вимірі електронних характеристик нанонеоднорідних матеріалів (ННМ), який ґрунтується на теорії зв'язку електронних параметрів ННМ та визначальних параметрів гетерогенної структури, що включають електронні та діелектричні характеристики матриці базового матеріалу і речовини імплантованих нановключень та разом із геометричними та концентраційними параметрами підсистеми неоднорідностей утворюють «простір фізичних параметрів завдання» [4]. Формування локальної структура електронних рівнів зразків ННМ, у відповідності до принципу мінімуму функціоналу Гельмгольца системи, реалізується таким чином, щоби їх кореляційна електростатична енергія у рівновазі була щонайменшою із можливих. Фізично це відповідає наявності в об'ємі миттєвих електронеутральных областей – чарунок електронеутральності, що виокремлюють нановключення в об'ємі зразка. Проводячи статистичне усереднення за статистичним ансамблем миттєвих чарунок електронеутральності для виділеного нановключення в матриці базового матеріалу (БМ), яка є однозв'язною просторовою областю, у якій розподілені нановключення, незводжувальну проблему взаємодії мікрополів і зарядів в ННМ переводимо в ранг ефективної електростатичної задачі про розподіл самоузгодженого потенціалу і локальної густини заряду в усередненій за ансамблем статистичній чарунці електронеутральності [1-2]. У наближенні локальної термодинамічної рівноваги (ЛТР) локальний рівень Фермі F носіїв на межі чарунки S_c^z є безпосередньо пов'язаним з локальним значенням концентрації електронів в об'ємі базового матеріалу. З огляду на однорідність електрохімічного потенціалу в об'ємі ННМ, маємо дві умови, щодо визначення F : 1) рівняння електронеутральності чарунки в цілому; 2) умову спряження електростатичних полів на межі БМ та ІВ. Вказані умови є достатніми для визначення розподілу локального самоузгодженого електростатичного поля в об'ємі електронеутральных чарунок, а отже, маючи на увазі однорідність електрохімічного потенціалу, для отримання локальних розподілів густини носіїв в об'ємі матриці базового матеріалу та нановключень. Для ІВ і чарунок циліндричної форми (рис.1), у рамках наближення

ДІТР та з використанням апроксимації Томаса-Фермі для дисперсійного рівняння носіїв, ґрунтуючись на уявленнях статистичного «плазмового підходу чарунок» [4], розбудована фізична модель і одержана загальна система рівнянь збереження і кінетики щодо визначення розподілу електрохімічного потенціалу носіїв в об'ємі ННМ. Загалом, для j-го нановключення ($j > 1$ – визначає сорт ІВ, $j = 1$ – відповідає просторовій області чарунки, «зайнятій» БМ (рис.2)) радіальний розподіл самоузгодженого потенціалу дефінують спряжені рівняння Пуассона-Фермі

$$\frac{d^2\phi_i}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{d\phi_i}{dr} = \frac{4e}{3\pi \cdot \epsilon_{pi}} \cdot \left(\frac{2 \cdot m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \left[(E_{Fi})^{3/2} - (E_{Fi}^0)^{3/2} \right];$$

$$\frac{d^2\phi_j}{dr^2} + \frac{1}{r} \cdot \frac{d\phi_j}{dr} = \frac{4e}{3\pi \cdot \epsilon_{pj}} \cdot \left(\frac{2 \cdot m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \cdot \left[(E_{Fj})^{3/2} - (E_{Fj}^0)^{3/2} \right];$$
(1)

Тут: ϕ_i – самоузгоджений потенціал в БМ чарунки в об'ємі ($C_{\xi j} \setminus V_{pj}$), V_{pj} – власний об'єм j-го ІВ; r – радіальна координата; e – елементарний заряд; ϵ_{pi} – діелектрична проникність БМ; m_e – маса електрона; E_{Fi} – локальні значення енергії Фермі носіїв в БМ у межах чарунки; E_{Fi}^0 – значення енергії Фермі у незбуреному БМ. Позначення другого рівняння задають область, що зайнята в $C_{\xi j}^z$ речовиною ІВ.

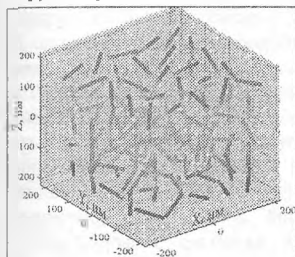


Рис.1. Елемент об'єму ННМ із стохастичною системою циліндричних нановключень.

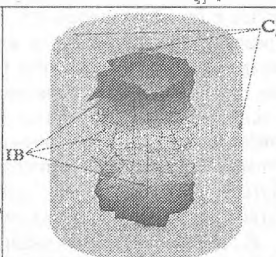


Рис. 2. Миттєва статистична чарунка C_{ξ} із заекраниваним ІВ циліндроподібної форми.

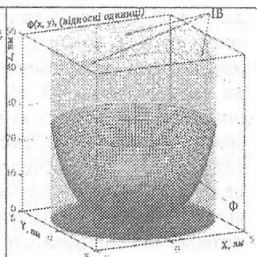


Рис. 3. Розподіл самоузгодженого потенціалу Φ у власному об'ємі ІВ.

Комп'ютерний експеримент на основі розв'язків системи (1) було проведено для широкої області визначальних параметрів ННМ характерних для впроваджень: значень рівнів та енергій Фермі речовини базового матеріалу та нановключень (F_i^0 та F_j^0 , E_{Fi}^0 і E_{Fj}^0), діелектричної проникності БМ та ІВ (ϵ_{pi} і ϵ_{pj}), температури концентрації та геометричних параметрів циліндричних нановключень (радіусу основи та фактора форми ефективних циліндрів). Якісний хід самоузгодженого потенціалу всередині ІВ представлено на рис. 3.

Параметричні залежності електронних характеристик зразків з нановключеннями, зокрема з дефектами заповнення об'єму [4], визначені в плазмовому підході, добре узгоджуються з даними експерименту відомими із літературних джерел.

- [1] V.I. Marenkov, Journal of Molecular Liquids.–2005.–Vol.120, Nu. 2.– P. 181.
- [2] V.I. Marenkov, Nanomaterials: Applications & Properties. - 2011. – P. 82.
- [3] B.I. Marenkov, СЕМСТ-5, Тези доп. – Україна, Одеса, 4-8 червня 2012 р.– С. 62 .
- [4] V.I. Marenkov, Materials XIV International Conference Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems.–May 20–25, 2013 Year, Ivano-Frankivsk, Ukraine.– P. 317.
- [5] V.I. Marenkov, Ukr. J. Phys. 2014, Vol. 59, N 3.– P. 257.