

СТАТИСТИЧНА КОНЦЕПЦІЯ МОДЕЛЮВАННЯ ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ МАТЕРІАЛІВ З МІКРОНЕОДНОРІДНОСТЯМИ ЗАПОВНЕННЯ ОБ'ЄМУ

Маренков В.І., Кучерський А.Ю.

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова
вул. Дворянська, 2, 65026 Одеса, Україна, e-mail: maren0@ukr.net

Нагальним імперативом останніх десятиріч в галузі створення мікросенсорів є розвиток теоретичних і експериментальних досліджень електронних властивостей їх виокремлених елементів з геометричними розмірами співмірними з міжмолекулярними відстанями в твердому тілі і такими, що порівнюються з власним розміром молекул [1]. Окремим і особливо важливим для впровадженнь аспектом є визначення ефективних електронних характеристик мікронеоднорідних матеріалів з дефектами заповнення об'єму, просторова протяжність яких належить нанометровій шкалі. У цьому випадку ферміївська довжина носіїв базового матеріалу «задає» масштаби, що ними визначено межі прояву квантово-розмірних ефектів в об'ємі мікронеоднорідного зразка. В існуючих підходах, щодо опису впливу дефектів заповнення об'єму зразка: мікротріщин, мікрошпарин, мікропор [2] на електронні характеристики матеріалу з неоднорідностями, зокрема пористого кремнію [3], використовуються результати квантово-механічних розрахунків з великою кількістю припущень та підгоночних параметрів, що значно ускладнює, навіть на якісному рівні, інтерпретацію даних експерименту. В той же час, у реальних зразках геометричні розміри включень характеризуються функціями розподілу зі значною дисперсією, що висуває на передній план проблему статистичного осереднення за ансамблем полідисперсних мікронеоднорідностей. Таким чином, з огляду на кулонівську дальню дію, задача визначення ефективних електронних властивостей мікронеоднорідного матеріалу переводиться у ранг незводжувальної багаточастинкової проблеми, у напрямку вирішення якої зроблено лише перші кроки. В представленій роботі, із залученням результатів статистичного чарункового підходу опису електронних властивостей гетерогенних плазмових систем [4], розбудовується та набуває закінчених форм підґрунтя статистичної концепції моделювання електронних властивостей матеріалів з мікронеоднорідностями заповнення об'єму. Розглянуто важливі для фундаментальних досліджень та впровадженнь проблеми іонізації і переносу електричного заряду в мікронеоднорідних гетерогенних напівпровідникових матеріалах сучасних нано-технологій, зокрема у пристінковій плазмі пористих і шпаристих матеріалів. Запропоновано статистичний метод визначення осереднених за об'ємом ефективних електронних характеристик речовини з гетерогенними включеннями, який ґрунтується на чарунковій моделі рівноважних електрон-іонних процесів поблизу виокремленої поверхнею екстремуму самоузгодженого потенціалу кулонових неоднорідностей в околі макровключень (пор чи шпарин складної геометрії, що утворюють ансамбль порушень заповнення об'єму у зразку базового матеріалу).

Основним моментом пропонуємого статистичного підходу є визначення локального розподілу носіїв шляхом осереднення за ансамблем миттєвих електронейтральних областей, що утримують мікронеоднорідності, та виділені багатозв'язною поверхнею $\Pi_{\left| \frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0 \right.} \left(E_{\vec{n}} = \frac{\partial \varphi}{\partial n} - \right.$

нормальна складова миттєвого електростатичного поля на поверхні Π , яка виокремлює індивідуальні інорідні включення в матриці основного матеріалу зразка). Зазвичай неоднорідності хаотично розподілені в об'ємі базового матеріалу зразка, що ним утворюється однозв'язна просторова область. Причому кожне з включень (об'єм, у якому відсутні структурні одиниці речовини - шпарини або пори тієї чи іншої форми) - завжди оточується базовим матеріалом зразка. Шпарини та пори можуть утримувати електрони, емітовані з речовини зразка, а також і ті, що проникли в об'єм шпарини внаслідок тунельного ефекту, і, таким чином, характеризуються певним від'ємним зарядом. При

нормальних умовах потік електронів емісії знехтливо малий і для пор мезоскопічних розмірів електрони, які локалізуються в їх об'ємі, справедливим є розподіл Максвела – Больцмана. В області нанорозмірів пор, рівень Фермі носіїв залежить від електростатичного поля подвійного електричного шару поверхні, що нею обмежено пору, і суттєвим є врахування квантових поправок у дисперсійному рівнянні. Наявність гетерогенних включень породжує просторову неоднорідність миттєвого розподілу об'ємної густини електростатичного заряду у тілі зразка. Замкнена просторова область, що оточує пору - електронейтральна, і, внаслідок теплових флуктуацій у тілі зразка, неперервно змінюється у часі, причому ці зміни є зкорельованими з флуктуаціями електричного заряду електронів та іонів, які локалізуються в об'ємі виділеної пори. Миттєві розподіли електростатичного потенціалу та об'ємного заряду, дефінуються рівняннями Пуасона. Далекосяжний характер електростатичної взаємодії електронів провідності та іонного остову призводить до ефектів екранування та виникнення квазінейтральності в об'ємі зразка, тобто мова йде про електрон-діркову плазму. Причому поняття просторового масштабу розділу зарядів у такій системі потребує, на відміну від класичної газової плазми, де таку роль відіграє радіус Дебая, уточнення та нової інтерпретації. Теплові флуктуації локальної густини електричного заряду та осереднене електростатичне поле гетерогенних включень у матриці матеріалу основного зразка сумісно утворюють миттєвий розподіл просторового заряду та певний «фон» самоузгодженого електростатичного поля, яким, власне, і «контролюється» квазінейтральність зразка. В рівноважній системі з температурою T густина електронного компоненту визначається рівнем Фермі (електрохімічним потенціалом) електронної підсистеми. У випадку пор і шпарин, що утворюють множину виокремлених елементів в матриці основного матеріалу, в координатах Ейлера, пов'язаних з об'ємом окремого включення, квазінейтральність реалізується за рахунок існування в області простору, конгруентній з власним об'ємом зразка, миттєвих локальних областей нульового заряду - чарунок квазінейтральності, кожна з яких утримує в собі об'єм шпарини або пори, і просторові масштаби якої достатньо малі порівняно із загальною протяжністю системи (зразка в цілому). Осереднення розподілу миттєвого самоузгодженого потенціалу за ансамблем електронейтральних чарунок зразка надає можливість проводити визначення рівня Фермі електронів зразка у рамках ефективної електростатичної задачі щодо розподілу заряду та потенціалу в об'ємі осередненої чарунки електронейтральності. Кінцево функціональну залежність рівня Фермі електронів мікронеоднорідного зразка з дефектами заповнення об'єму визначається із системи рівнянь збереження заряду та балансу потоку електронного компоненту на поверхні об'ємного включення із залученням, з метою врахування впливу квантоворозмірних ефектів у тілі зразка, квазікласичної апроксимації Томаса-Фермі. Комп'ютерна симуляція електронних характеристик пористих та шпаристих матеріалів, що її проведено на основі моделі для нанообласті геометричних розмірів об'ємних включень, які мають порядок фермієвської довжини носіїв базового матеріалу, вказує на суттєвий вплив співвідношення $\langle (\text{концентрація})^{1/3} / (\text{розмір}) \rangle$ у ансамблі неоднорідностей на параметри енергетичного спектру носіїв. Дані, що їх одержано в представлений теоретичній моделі, відносно впливу геометричного розміру неоднорідностей на ефективний рівень Фермі носіїв в тілі поруватих зразків, добре якісно та кількісно узгоджуються з відомими з літератури результатами експериментальних вимірів характеристик зразків пористого кремнію, і можуть бути безпосередньо використані для проектування мікросенсорних систем.

1. Marenkov V.I. Journal of Molecular Liquids, 2005, Vol.120, pp.181-184.

3. Amato Giampiero, Delerue C., von Bardeleben H. J. Structural and optical properties of porous silicon nanostructures.- OPA, 1079 LH Amsterdam, The Netherlands, 1997 – 633 p.

4. Маренков В.І., Кучерський А.Ю. Статистична концепція розгляду і апроксимація Томаса Фермі в теорії властивостей гетерогенних плазмових систем