

ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ ГЕТЕРОГЕННИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ З НАНОРОЗМІРНИМИ ПОРАМИ В ОБ'ЄМІ

Маренков В. І.

Одеський національний університет імені І.І. Мечникова

Перспективні розробки в області наносенсорної електроніки, орієнтовані на можливості нової елементної бази з використанням гетерогенних напівпровідникових матеріалів, висувають на передній план нагальну теоретичну проблему - створення нових прикладних методів моделювання та визначення ефективних електронних властивостей напівпровідників з мікрровключеннями в об'ємі. Для наносенсорів та аналізаторів газових середовищ, визначальним (у сенсі механізму взаємодії реагента та чутливого елемента) є зміна електронного спектру контактного шару, зумовлена локальними електричними полями, що діють на межі мікронеоднорідності базового матеріалу в об'ємі гетерогенного напівпровідника (ГН). У випадку поруватих структур (див. рис.1), зміни локальної концентрації носіїв на границі пора - напівпровідник спричинені виникненням подвійного шару електричного заряду, що виникає внаслідок обміну електронами між напівпровідниковою матрицею та об'ємом пори. З використанням квазікласичного наближення Томаса-Фермі для носіїв та на основі уявлень статистичної моделі квазінейтральних чарунок [1], щодо реалізації електронейтральності в ГН, незводжувальну проблему статистичної рівноваги електростатичних мікрополів і зарядів ГП, переведено в ранг ефективної одночастинкової задачі - визначення локального розподілу об'ємного заряду та самоузгодженого потенціалу в ефективній чарунці електронейтральності ГН- C_{ξ} , яка утримує мікропору (рис.2).

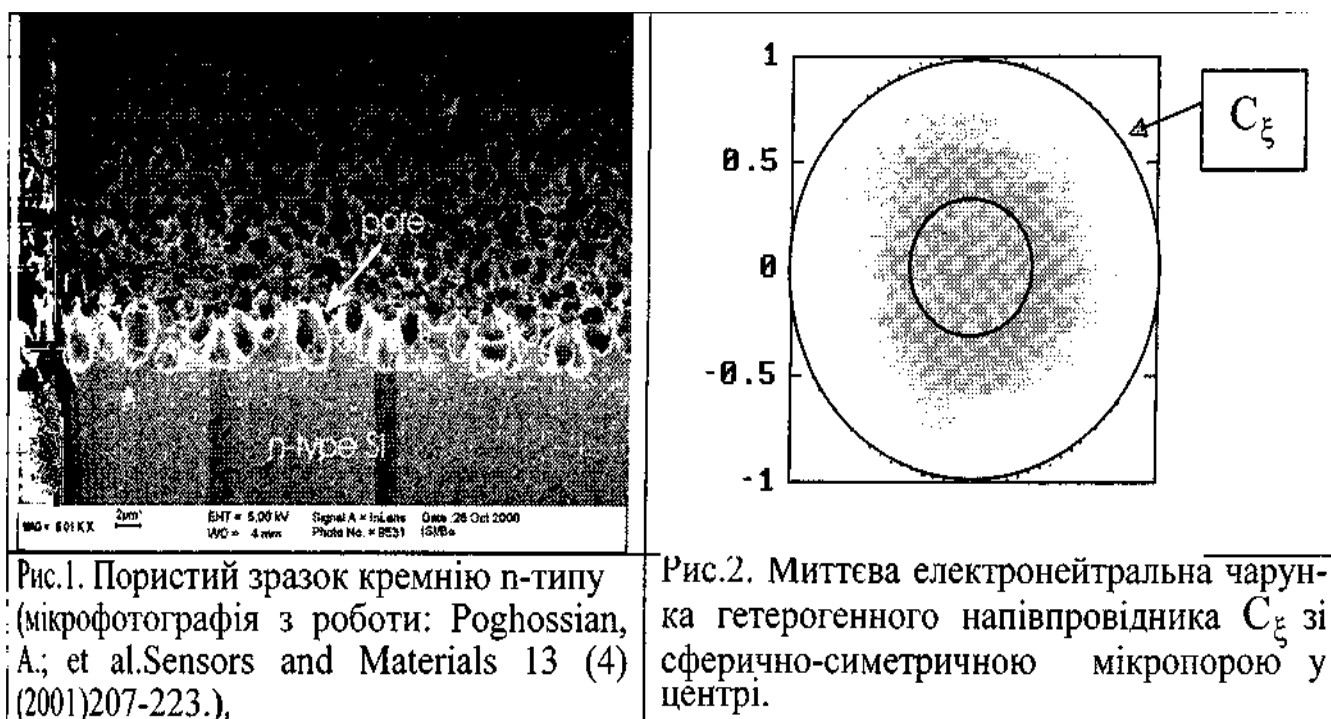


Рис.1. Пористий зразок кремнію p-типу (мікрофотографія з роботи: Poghossian, A.; et al. *Sensors and Materials* 13 (4) (2001)207-223.),

Рис.2. Миттєва електронейтральна чарунка гетерогенного напівпровідника C_{ξ} зі сферично-симетричною мікропорою у центрі.

Визначення локального рівня Фермі F для електронного компоненту ГН здійснюється шляхом статистичного осереднення за ансамблем миттєвих електронейтральних чарунок, що утримують виділену пору (рис.2) в послідовні моменти часу. Для ізотропного ГН система рівнянь збереження та кінетики для осередненої за чарунки C_{ξ} встановлює функціональний зв'язок між електрохімічним потенціалом (рівнем Фермі F) та визначальними термодинамічними параметрами: температурою - T концентрацією - n_p , розмірами - r_p , і електронними характеристиками напівпровідникової матриці (рівнем Фермі базового матеріалу - F^0 , дном зони провідності - E_c , та шириною забороненої зони - E_g). В області визначальних параметрів ГН, характерній для впроваджень, проведено комп'ютерний експеримент з визначення електронних властивостей зразків ГН з різною геометрією та концентрацією пор. Дані комп'ютерної симуляції для зразків пористого кремнію проведеної в рамках пропонуємого підходу, добре узгоджуються з літературними даними натурного експерименту.

І. Маренков В.І. //НАНСИС 2007, 21-23 листопада 2007. - Київ, НАН, С. 494.