

А. В. Мисевич, канд. физ.-мат. наук, доц.,
А. Н. Лаппо, ассист. (БГТУ, г. Минск)

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КУЛОНОВСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЗОНЫ В МАТЕРИАЛАХ С ПРЫЖКОВОЙ ПРОВОДИМОСТЬЮ

В настоящее время активно разрабатываются электронные устройства (газовые сенсоры, светоизлучающие диоды, солнечные элементы) на основе органических веществ и в частности на основе молекулярных кристаллов (фталоцианинов, периленов и др.). Для теоретического описания электрофизических свойств таких материалов необходимо знать, как влияет кристаллическая структура и наличие дефектов в кристалле на положение уровня Ферми. Широко известно выражение для энергии Ферми классического полупроводника, полученное в предположении малой концентрации легирующей примеси и малой степени компенсации [1]

$$\mu = 0,61 \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon r}, \quad (1)$$

где e – элементарный заряд; ϵ_0 – электрическая постоянная; ϵ – диэлектрическая проницаемость материала; r – среднее расстояние между атомами легирующей примеси. Данное выражение часто используется при описании свойств молекулярных кристаллов, однако оправданность такого приближения никем не доказана. Цель данного исследования – расчет энергетической плотности локализованных состояний и энергии Ферми в приближении кулоновского взаимодействия носителей заряда с заряженными примесями в кристаллах с наиболее простыми типами кристаллических решеток – кубической и тетрагональной.

В основу моделирования были положены следующие исходные положения: 1) рассматривалась решетка размерами $10 \times 10 \times 10$ элементарных ячеек; 2) дефекты решетки имели отрицательный элементарный заряд и распределялись по объему решетки случайным образом; 3) доля дефектов варьировалась в пределах 0,001–0,01; 4) диэлектрическая проницаемость среды принималась равной 1; 5) концентрация узлов решеток варьировалась в пределах 10^{27} – 10^{28} м⁻³; 6) степень отклонения тетрагональной решетки от кубической характеризовалась параметром $t = c/a$, где c и a – параметры элементарной ячейки.

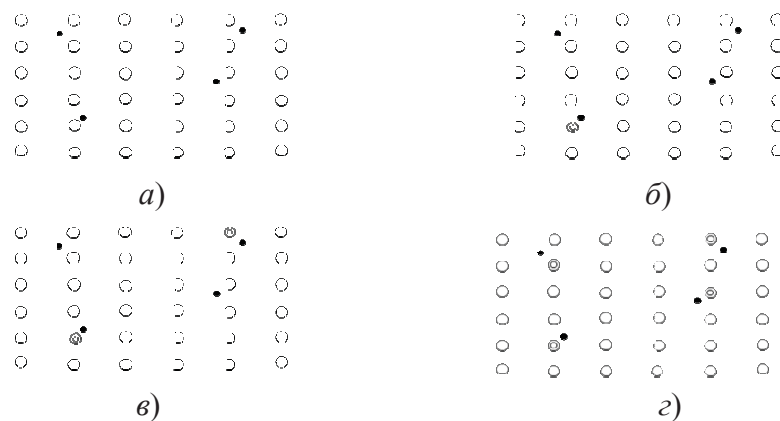


Рисунок 1

Алгоритм моделирования кулоновского расщепления зоны проводимости следующий:

1. Расчет параметров элементарной ячейки, исходя из концентрации узлов n и параметра тетрагональности t

$$a = b = (t \cdot n)^{1/3}, \quad c = t \cdot a, \quad (2)$$

2. Расчет числа заряженных дефектов N_y , исходя из их доли y в решетке

$$N_y = y \cdot N_a \cdot N_b \cdot N_c, \quad (3)$$

где $N_a \cdot N_b \cdot N_c$ – размер решетки.

3. Случайное распределение заряженных дефектов по объему решетки (рисунок 1, а).

4. Расчет кулоновского потенциала, создаваемого заряженными дефектами в узлах решетки.

5. Размещение первого носителя заряда (дырки) в узле с наибольшим потенциалом (рисунок 1, б).

6. Расчет кулоновского потенциала, создаваемого заряженными дефектами и носителем заряда в узлах решетки.

7. Размещение следующего носителя заряда (дырки) в узле с наибольшим потенциалом (рисунок 1, в).

8. Повторение действий 6 и 7, до тех пор, пока все носители заряда, число которых равно числу дефектов, не займут наиболее выгодные положения в решетке (рисунок 1, г).

9. Расчет результирующего кулоновского потенциала на всех узлах решетки.

10. Построение функции плотности электронных состояний решетки. На рисунке 2 в качестве примера показана функция плотности состояний для простой кубической решетки при $n = 10^{27} \text{ м}^{-3}$ и $y = 0,005$.

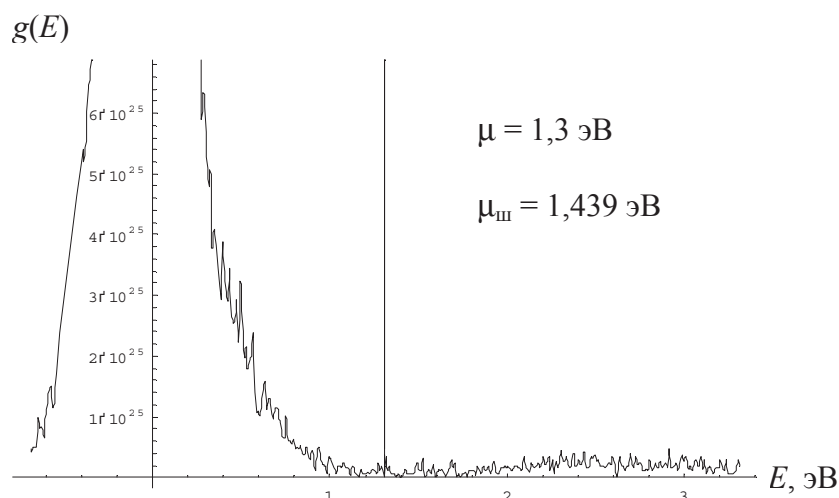


Рисунок 2

11. Расчет энергии Ферми, исходя из полученной плотности состояний. Для функции плотности состояний, показанной на рисунке 2, значение энергии Ферми составило 1,3 эВ, тогда как расчет по формуле (1) дает значение 1,439 эВ.

Для простой кубической и тетрагональной решеток по данному алгоритму были рассчитаны зависимости энергии Ферми μ от доли заряженных дефектов решетки y , параметра t , характеризующего тетрагональность решетки, и от доли примесных центров локализации в узлах решетки.

Анализ результатов моделирования позволяет сделать следующие выводы:

1. В простой кубической и тетрагональной кристаллических решетках плотность электронных состояний имеет кулоновскую щель в окрестности уровня Ферми.

2. Формула (1) дает заниженные значения энергии Ферми для простой кубической и тетрагональных кристаллических решеток.

3. Энергия Ферми в кубических и тетрагональных кристаллических решетках не зависит от доли заряженных дефектов решетки.

4. Увеличение параметра t тетрагональной кристаллической решетки приводит к возрастанию энергии Ферми.

5. Энергия Ферми в решетке, содержащей примесные центры локализации, зависит главным образом от концентрации тех состояний, энергетические уровни которых расположены ближе к уровню Ферми.

ЛИТЕРАТУРА

1. Шкловский, Б. И. Электронные свойства легированных полупроводников / Б. И. Шкловский, А. Л. Эфрос – М.: Наука, 1979. – 416 с.