



ВІДКРИТИЙ МІЖНАРОДНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
РОЗВИТКУ ЛЮДИНИ «УКРАЇНА»

П. М. ТАЛАНЧУК, О. С. МОРОЗ

**ТЕОРІЯ
НАПІВПРОВІДНИКОВИХ
СЕНСОРІВ ГАЗУ:
фундаментальні основи,
аналіз, синтез**

Навчальний посібник

Київ 2008



УДК 544:621.315.592
ББК 30.11
Т16

*Рекомендовано до друку
Вченою Радою Університету «Україна»
(Протокол № 2 від 27.04.2007 р.)*

Таланчук П. М.
Т16 Теорія напівпровідникових сенсорів газу: фундаментальні основи, аналіз, синтез / П. М. Таланчук, О. С. Мороз. — 3-тє вид., випр. та допов. — К. : Університет «Україна», 2008. — 256 с.

ISBN 978-966-388-259-8.

У посібнику викладено результати математичного моделювання напівпровідникових сенсорів газу, температури та сонячних елементів, основані на класичних уявленнях про природу електронних станів на ідеальній та реальній поверхнях напівпровідникових бінарних сполук типу окислів металів. Розглянуто питання аналізу та синтезу відповідних технічних об'єктів на основі отриманих у роботі математичних моделей.

Для студентів та аспірантів приладобудівних, фізичних та радіофізичних спеціальностей університетів. Може бути корисним для фахівців, які працюють у галузі фізики та фізичної хімії (каталізу та кінетики гетерогенних реакцій) напівпровідників, а також електроніки твердого тіла.

УДК 544:621.315.592
ББК 30.11

ISBN 978-966-388-259-8

© Таланчук П. М., Мороз О. С., 1997
© Таланчук П. М., Мороз О. С., 2001
© Таланчук П. М., Мороз О. С., 2008
© Університет «Україна», 2008

ЗМІСТ

<i>Від авторів</i>	7
<i>Вступ</i>	9
<i>Замість передмови</i>	10
<i>Англійський варіант</i>	
<i>The foreword to the third issuing</i>	16
<i>Умовні позначення</i>	18
Глава I. ФЕНОМЕНОЛОГІЧНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ СИСТЕМИ	
ГАЗ — НАПІВПРОВІДНИК	21
Розділ 1. Постановка задачі моделювання	21
Розділ 2. Формалізація задачі	27
Розділ 3. Система рівнянь матеріального балансу	36
Розділ 4. Фундаментальна система рівнянь масопереносу та переносу заряду в напівпровідниковому матеріалі	43
Глава II. СТАТИКА: СТАТИСТИКА ЕЛЕКТРОНІВ ТА ДІРОК У МЕТАЛООКИСНОМУ НАПІВПРОВІДНИКУ	49
Розділ 1. Тотожності зонних діаграм напівпровідникових структур	49
Розділ 2. Коефіцієнти інжекції та екстракції носіїв заряду об'ємними домішковими центрами	55
Розділ 3. Узагальнена статистика багатозарядних домішкових об'ємних електронних станів	62
Глава III. СТАТИСТИКА ЕЛЕКТРОНІВ ТА ДІРОК НА ПОВЕРХНІ МЕТАЛООКИСНОГО НАПІВПРОВІДНИКА	73
Розділ 1. Коефіцієнти гетерогенної поверхневої реакції	73
Розділ 2. Узагальнена статистика багатозарядних поверхневих електронних станів	81
Розділ 3. Тотожності узагальненої статистики багатозарядних поверхневих електронних станів	90

Глава IV. РОЗВ'ЯЗОК ОДНОВИМІРНОЇ КРАЄВОЇ ЗАДАЧІ ДЛЯ РІВНЯННЯ ПУАССОНА У ВИПАДКУ НАПІВПРОВІДНИКА З БАГАТОЗАРЯДНИМИ ДОМШКОВИМИ ЦЕНТРАМИ	99
Розділ 1. Перший інтеграл краєвої задачі і напруженість електричного поля в елементах структури напівпровідникового шару	99
Розділ 2. Розподіл потенціалу в напівпровідниковій пластині субмікронних розмірів	108
Розділ 3. Провідність монокристалічного шару напівпровідника субмікронної товщини	114
Глава V. АНАЛІЗ СТАТИЧНОЇ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СЕНСОРІВ ГАЗУ: ІДЕАЛЬНІ ГАЗИ	125
Розділ 1. Провідність полікристалічної структури	125
Розділ 2. Ізотерми хемосорбції активних газів на поверхні напівпровідника	130
Розділ 3. Чутливість напівпровідникових сенсорів	136
Розділ 4. Селективність напівпровідникових сенсорів газу.	140
Глава VI. МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКУ ОСНОВНИХ ЕЛЕКТРОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРІАЛУ ЧУТЛИВОГО ЕЛЕМЕНТУ	143
Розділ 1. Організація обчислювального експерименту	143
Розділ 2. Методика розрахунку рівня легування у простих окислах металів	146
Розділ 3. Методика розрахунку поверхневого потенціального бар'єра у шарі напівпровідника субмікронних розмірів	158

Глава VII. ІНФОРМАТИВНІ ПАРАМЕТРИ МАСОПЕРЕНОСУ У СИСТЕМІ ПЛОСКИХ ПЛАСТИН — ОДНОВИМІРНЕ НАБЛИЖЕННЯ	162
Розділ 1. Ізольована плоска пластина	162
Розділ 2. Бінарна система плоских пластин . . .	166
Розділ 3. Частковий випадок масоперееносу у бінарній системі плоских пластин	169
Розділ 4. Дослідження асимптотичного поводження передаточних функцій	171
Розділ 5. Постійні часу релаксації інформативного параметра вимірюваного сигналу при масоперееносі у бінарній системі плоских пластин	174
Глава VIII. СИСТЕМНО-СТРУКТУРНИЙ АНАЛІЗ ЛІНІЇ ВИМІРЮВАЛЬНОГО ПЕРЕТВОРЕННЯ ІНФОРМАТИВНОГО ПАРАМЕТРА ВХІДНОГО СИГНАЛУ	181
Розділ 1. Хемосорбція простих ідеальних газів	181
Розділ 2. Системно-структурний аналіз відгуку поверхні напівпровідника в умовах поперечного електричного поля	200
Глава IX. АНАЛІЗ І СИНТЕЗ СЕНСОРІВ У НАБЛИЖЕННІ ДО КОНЦЕПЦІЇ ХАУФФЕ	212
Розділ 1. Хемосорбція простих ідеальних газів на атомарно чистій поверхні напівпровідника	212
Розділ 2. Адсорбція акцепторного газу за наявності поверхневого легування	216
Розділ 3. Адсорбція акцепторного газу за наявності жорсткого зворотного зв'язку по поверхневому потенціалу	222

Глава X. ОПТИМАЛЬНИЙ СИНТЕЗ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СЕНСОРІВ	229
Розділ 1. Загальні питання оптимального проектування напівпровідникових сенсорів	229
Розділ 2. Аналіз впливу типу макроструктури матеріалу чутливого елемента та її характеристичних розмірів на метрологічні характеристики сенсорів	233
Розділ 3. Оптимізація параметрів металоокисного чутливого елемента за критерієм максимуму чутливості	239
Розділ 4. Оптимізація метрологічних характеристик металоокисного чутливого елемента за критерієм максимуму селективності	241
<i>Література</i>	244

ВІД АВТОРІВ

У 1997 році опубліковано перший варіант цієї монографії. Піонерська робота, в якій для розв'язання задач метрології застосовано математичні методи, зокрема апарат математичного моделювання. Як універсальний інструмент застосовано дослідження технологічних процесів та технічних систем. Завдяки розробленому математичному забезпеченню обґрунтовано фундаментальні засади та створено базис для вирішення задач аналізу та синтезу вимірювальних перетворювачів на основі напівпровідникових сенсорів газу.

Міждисциплінарне значення монографії — послідовно застосована парадигма бачення технічних об'єктів, властива педагогічному колективу кафедри ПТМ приладобудівного факультету НТУУ «КПІ» епохи розвинутого соціалізму (Захарін М. З., Трубенко О. Д., Гераїмчук М. Д., Безвесільна О. М.). В якій пропорції комбінуються творче джерело, евристика, чиста техніка та прагматика — оцінить читач.

У третьому виданні виправлено помічені помилки та реалізована покращена версія стилю попередніх видань. Головним чином третя версія покращена завдяки професіоналізму колективу редакції Університету «Україна». Робота підготовлена до друку на сучасній поліграфічній базі ВДК Університету із застосуванням новітніх друкарських технологій. Сподіваємось, це поліпшить сприйняття ідей наших вчителів новими поколіннями дослідників.

Представлені теоретичні результати в сукупності вирішують важливу наукову проблему в галузі екологічного приладобудування. Проте репрезентована технологія (рівня 90-х років минулого століття) може бути застосована і в інших галузях науки і техніки де стоять аналогічні завдання — завдання підвищення рівня математизації, концепцій, завдання підвищення рівня проникнення математики в проблеми розв'язку задач аналізу об'єктів дослідження та синтезу нових рішень. У першу чергу, це галузі власне екології та енергозберігаючих технологій, хімічна кінетика та гетерогенний каталіз.

Просимо вибачення у читача за повільний темп модернізації теорії. Все можна вдосконалити, але потрібні інвестиції. А так — маємо те, що маємо. Отож — робіть як ми, робіть краще нас.

Таланчук П. М., Мороз О. С.

ВСТУП

Завдання математичного відображення фізико-хімічних процесів, що лежать в основі функціонування металоокисних високотемпературних сенсорів концентрації газу [1–5], вимагає для свого вирішення застосувати та узгодити між собою: 1) теорію Шоткі, Вагнера, Крьогера та інших [6–14], яка описує статистику системи {газ}-{бінарна сполука} у стані термодинамічної рівноваги; 2) теорію електронних процесів на поверхні напівпровідника Ф. Ф. Волькенштейна [15] та напівемпіричні, переважно описові, енциклопедичного характеру роботи С. Р. Моррісона, що наповнюють її [18–20]; 3) теорію поверхневих нерівноважних процесів у напівпровіднику А. В. Саченка [21]; 4) теорію Гаррета — Браттайна [22], а також їхніх послідовників, які робили спроби екстраполяції цієї класичної праці на більш широкий клас задач [23–27]; власне традиційний курс фізики напівпровідників [28–33].

У цій роботі викладено наш варіант узагальнення перерахованих концепцій для математичного обґрунтування процесів перенесення речовини та заряду в гетерогенній системі {газ}-{бінарний окисел}-{основа}, оснований на системному підході [1.8] до розробки математичних моделей фізичних об'єктів. Додатково в деталях розглянуто також ряд суміжних питань.

ЗАМІСТЬ ПЕРЕДМОВИ

1. Вперше виконана екстраполяція фундаментальної системи рівнянь напівпровідника на більш широкий клас задач — напівпровідникові бінарні сполуки типу окислів металів, які знаходяться у стані термодинамічної рівноваги з парами своїх компонент та з оточуючим газовим середовищем при наявності поверхневого та об'ємного легування амфотерними, загалом, примісними центрами. Враховано широкий спектр реальних параметрів: структурні особливості матеріалу, розміри та форма зерна напівпровідникового шару, стехіометрія матеріалу, власливості міжзеренних прошарків, параметрів підложки, наявність каталітичних добавок, поперечного електричного поля, фотодесорбції тощо.

2. Виконано аналіз результатів різних авторів та встановлено тотожності зонних діаграм напівпровідникових структур. Створено базис для вирішення задач аналізу та синтезу вимірювальних перетворювачів на основі напівпровідникових сенсорів газу.

3. Виконано екстраполяцію основних положень теорії Жака Бургуена та Мішеля Ланно і реалізовано адаптацію їх концепцій в формалізованих термінах. Отримано співвідношення для коефіцієнтів екстракції та інжекції рухливих носіїв заряду об'ємними багатозарядними центрами. Відповідні вирази записані із врахуванням тотожностей напівпровідникових структур у системах результатів різних авторів.

4. Для довільних умов стану електронно-діркового газу розглянуто статичні режими процесів перезарядки домішкових центрів в об'ємі напівпровідника. Отримано співвідношення, що описують повну концентрацію об'ємних домішкових центрів та їх повний вклад в об'ємний заряд через константи відповідних квазіхімічних реакцій цих центрів із зонами (провідності та валентною) напівпровідника. Введено в розгляд функцію f_{rk} , що визначає долю іонізованих центрів r -сорту в k -зарядовому стані в їх повній концентрації та отримано співвідношення, які виражають її через параметри квазіхімічних реакцій. Доведено коректність отриманих виразів.

5. Для випадку невідродженого напівпровідника параметри квазіхімічних реакцій представлено в термінах зонної моделі твердого тіла. Доведено коректність отриманих виразів. Показано, що статистика Фермі — Дірака є частковим випадком

отриманої узагальненої статистики багатозарядних домішкових центрів. Отримано формули для обчислення компонент отриманої статистики. Встановлено тотожності узагальненої статистики багатозарядних домішкових центрів для незбуреної поверхнею області напівпровідника та для області просторового заряду.

6. Виконано узагальнення теорії Гаррета — Бреттена на випадок напівпровідника кінечних розмірів з багатозарядними домішковими центрами. У рамках відповідної одновимірної краєвої задачі взято перший інтеграл та встановлено залежність потенціалу від координати в пластині субмікронних розмірів. Для функціоналу $F(u, u_0)$ отримано співвідношення в явному вигляді. Інтеграл для іонної компоненти об'ємного заряду представлено в термінах розвинутого в роботі формалізму через функцію $f_{\alpha k}$.

7. Досліджено розподіл потенціалу в пластині субмікронних розмірів для випадку, коли залежністю об'ємного заряду від потенціалу можна знехтувати. Отримано прості співвідношення в явному вигляді при збідненні поверхні основними носіями заряду та при малих вигинах зон. При малих вигинах зон вирази описують три ситуації: а) на обох поверхнях сформовані шари збіднення; б) на обох поверхнях сформовані шари збагачення; в) на кожній з поверхонь сформовані шари протилежного типу. Отримано прості співвідношення в явному вигляді для провідності монокристалічного шару напівпровідника субмікронних розмірів з електронною та донорною провідністю.

8. Виконано аналіз статичної характеристики напівпровідникових сенсорів газу. Досліджено провідність полікристалічного шару. Отримано ізотерми хемосорбції активних газів на поверхні напівпровідника. Виведено формули для чутливості та селективності напівпровідникових сенсорів газу.

9. Розроблено методики розрахунку основних електрофізичних характеристик матеріалу чутливого елементу: рівня легування (пряма та обернена задачі) та поверхневого потенціального бар'єру. Отримано аналітичні вирази для розрахунку рівня легування в простих окислах металів та в діоксиді олова.

10. Досліджено методами операційного обчислення інформативні параметри масопереносу в одновимірному наближенні. Отримані передаточні функції для ізолюваної пластини та для бінарної системи плоских пластин. Досліджено їх асимптотичне поведіння в початкові та кінцеві моменти часу. Показано, що постійні часу релаксації інформативного параметру вихідного

сигналу при масопереносі в бінарній системі плоских пластин залежать від параметрів сусідніх елементів.

11. Виконано системно-структурний аналіз лінії вимірювального перетворення інформативного параметру вхідного сигналу при хемосорбції простих ідеальних газів та в умовах поперечного електричного поля. Для основних типів ситуацій на поверхні побудовано топологічні моделі та отримані еквівалентні передаточні функції. Вихідні системи рівнянь представлені у формі Коші.

12. Проведено аналіз та синтез ідеальних сенсорів у наближенні концепцій Хауффе. Для випадку хемосорбції простих ідеальних газів на чистій поверхні напівпровідника побудовано топологічні моделі та отримано відповідні передаточні функції. Для випадку адсорбції газу при наявності поверхневого легування результати представлено в стандартній формі запису диференціальних рівнянь в операторному вигляді. Розглянуто адсорбцію акцепторного газу при наявності жорсткого зворотнього зв'язку по поверхневому потенціалові. Побудовано топологічні моделі та отримано відповідні передаточні функції. Виконано аналіз постійних часу.

13. Виконано аналіз впливу типу макроструктури матеріалу чутливого елемента та її характеристичних розмірів на метрологічні характеристики сенсорів. Обґрунтовано технологію анізотропного поверхневого легування. Виконано в термінах розробленого формалізму постановки задач оптимального проектування сенсорів газу за критерієм максимуму чутливості та за критерієм максимуму селективності.

ANNOTATSIYA

1. First the executed extrapolation of the fundamental system of evening of semiconductor on more wide class of tasks — semiconductor binary connections of type of oxides of metals which are found in a state of thermodynamics equilibrium with the pairs of it component and with a gas environment at presence of superficial one and at 'capacious alloying of amfoternimi, in the general case, by primisnimi centers. The wide spectrum of the real parameters is taken into account: structural to osoblivost material, sizes and form of corn of semiconductor layer, stehiometriya material, property of migzerennih layers, parameters of subspoon, presence of catalytic additions, transversal electric field, fotodesorbtsii and others like that.

2. The analysis of denotations of different authors is executed and are set to the identity of area diagrams of semiconductor structures. A base is created for the decision of tasks of analysis and synthesis of measuring transformers on the basis of semiconductor sensoriv of gas.

3. Extrapolation of basic positions of theory of Bourgouena and Mishelya Lanno Gaca is executed and adaptation of their conceptions is realized in terms of rozroblennogo formalism. Correlation is got for coeffitsientiv extraction and injectia of mobile transmitters of charge at 'by capacious multicharge centers. The proper expressions are written down taking into account totnognostey semiconductor structures in the systems of denotations of different authors.

4. For the arbitrary terms of the state of electronno-dircovogo gas the static modes of processes of recharging of admixture centers are considered in at 'emi semiconductor. Correlations, that describe complete concentration of by a volume admixture centers and their complete contribution to the by a volume charge through the constants of the proper cvazihimichescih reactions of these centers with the areas (conductivity and valency) of semiconductor, are got. The function of f_{rk} is entered in consideration, that determines the fate of the ionized centers of r -sortou in the k -zaryadovomou state in their complete concentration and correlations which express her through the parameters of cvazihimichescih reactions are got. Correctness of the got expressions is led to.

5. For the case of nevirodgennogo semiconductor the parameters of cvazihimichescih reactions are presented in terms of area model of solid. Correctness of the got expressions is led to. It is shown, that statistics Fermi-Diraca are the partial case of the got generalized statistics of multicharge admixture centers. Formulas for the calculation are got component of the got statistics. It is set to the identity of the generalized statistics of multicharge admixture centers for the unindignant at a surface region of semiconductor and for the region of spatial charge.

6. Generalization of theory Garreta-Brettana is executed in case of semiconductor of cinechnih sizes with multicharge admixture centers. Within the framework of the proper odnovimirnoi regional task the first integral is taken and dependence of potential is set on coodinati in the plate of submicron sizes. For to functional $F(u, u_0)$ spivvidnoshennnya is got in an obvious kind. Integral for ionic components at'capacious charge it is presented in terms of developed in work formalism through the function of $f_{\alpha k}$.

7. Distributing of potential is explored in the plate of submicron sizes for the case, when by dependence at'capacious charge it is possible to scorn from potential. Simple correlations are got in an obvious kind at impoverishment of surface the basic transmitters of charge and at the small bends of areas. At the small bends of areas expressions describe three situations: and) on both surfaces there are the formed layers of impoverishment;) on both surfaces there are the formed layers of enrichment; in) on each of surfaces the formed layers of opposite type. Simple correlations are got in an obvious kind for conductivity of layer monocristalichnogo of semiconductor of submicron sizes with electoronnovo and donornovo conductivity.

8. The analysis of static description of semiconductor sensoriv of gas is executed. Conductivity of policristalichnogo layer is explored. The isotherms of hemosorbtsii active gases are got on the surface of semiconductor. Formulas are shown out for a sensitiveness and selectivity of semiconductor sensoriv of gas.

9. The methods of computation of basic electro-physical descriptions of material of sensible are developed to the element: level of alloying (direct and reverse tasks) and superficial potential bar'erou. It is got analytical expressions for computation of level of alloying in the simple oxides of metals and at diocsidi tin.

10. The informing parameters of masoperenosou are explored by the methods of operating research in the one-dimensinal

approaching. The got transmission functions for an izolovannoi plate and for the binary system of flat plates. Their conduct asimptotichne is explored in the initial and eventual moments of time. It is shown, that permanent to time relacsatsii of informing to the parameter initial signal at masopernosi in the binary system of flat plates rely on the parameters of neighbouring elements.

11. The system-structural analysis of line of measuring transformation of informing to the parameter entrance signal at hemosobtsii is executed simple ideal gases and in the conditions of the transversal electric field. For the basic types of situations on a surface topology models and got equivalent transmission functions are built. Initial systems of evening presented in a form Coshi.

12. The analysis and synthesis of ideal sensoriv is conducted in approaching of conceptions Haouffe. For the case of hemosorbtsii simple ideal gases on the clean surface of semiconductor topology models are built and the proper transmission functions are got. For the case of adsorbtsiii gas at presence of the superficial alloying results are presented in the standard form of record of the difirentsiynih evening in an operator kind. Adsorption of actseptornogo gas is considered at presence of hard zvorotnogo zv'yazcou on superficial potential. Topology models are built and the proper transmission functions are got. The analysis of permanent is executed to time.

13. The analysis of influencing of type of macrostrouctouri of material of sensible is executed to the element and its characteristic sizes on metrologichni descriptions of sensoriv. Technology of the anizotropnogo superficial alloying is grounded. It is executed in terms of the developed formalism of raising of tasks of the optimum planning of sensoriv of gas on the criterion of maximum of sensitiveness and on the criterion of maximum of selectivity.

THE FOREWORD TO THE THIRD ISSUING

In the given monography is executed an extrapolation of a fundamental set equations of the semiconductor (to be exact, set of equations of an electromagnetic field of the James Clerk Maxwell for a self-consistent problem in pseudo-steady approaching) on one more broad class of problems — the semiconductor binary combination such as oxides of metals, which one are in a condition thermodynamic equilibriums with vapours the component and with ambient by gas medium in the case while surface and volumetric doping amphoteric, generally, impurity centers.

It is shaw, that the filling of volumetric impurity centers and electron surface state is described, for such problem, generalized statistics the Fermi-Dirac and, on this basis, is executed generalization of the theory Garret-Brattain on the described above class of problems (are obtained in a manifestative kind conforming ratio also are retrieved analytical solutions for the conforming integrals for bed depths of a semiconducting stuff close with sub-micron sizes). By methods of an operational calculus the analysis of informative parameters mass transfere and ionic component of electric charge transfere.

Thus, for the first time in activities on physical chemistry of a surface semiconductors the version of the substantiation of fundamental theory is offered of metal-oxide semiconductor gas sensors, temperature and solar members, by application of system approach to work out of mathematical models of physical objects it is ground generalizations five of classic development trends of physical chemistry and physics of semiconductors. Namely: 1) The theories of Schottky, Vagner, Kreger, which one describes a system «gas — binary compaund» in a condition thermodynamic equilibrium; 2) theory of electronic process on a surface of the semiconductor F. F. Walkenstain and complementing it of activities S. R. Morrison; 3) theory of surface non-equilibrium processes in the semiconductor A. V. Sachenko; 4) theory of Garret-Brattain and them follower, which one extrapolated this classic activity on more general particular cases; 5) alone traditional of a course of physics semiconductors.

Thus, the in essence new, fundamental outcome reaches — is built a universal metatheory of carry of material and charge in

heterogenous system «gas — surface of the semiconductor — alone semiconductor» in close to thermodynamic equilibrium conditions. Is executed activity on the joint different areas of knowledge. Is overcome a problem of absence of «interface», conformities between the separate partial theories. Are removed the majority lacks and errors having a place in some of them. Main the total — now all subject to calculate, is harmonic supplements one another. And it provided that the rather broad spectrum of actual parameters — size and shape of a semiconductor layer grain, stoichiometry of a stuff, property of the stratum between grain, parameters of a substrate etc.

Concerning problems of check of adequacy obtained mathematical models is necessary to mark, that problematics of each of theories-predecessors with stands by the designed writers of the theory is formulated, as partial cases new, more general paradigmes. Conclusions of a new metatheory for individual problems, which one are described by the previous theories, coincide correct conclusions these individual theories. Simultaneously, field of application offered the writers the concepts much more widely also contains, as the components, area applications of each of the above indicated theories-predecessors. All as though is iterated, but in higher and perfect plane, on one higher and perfect level.

The finally obtain new, more general paradigme, which one allows to overcome a fragmentariness, localization of consideration previous individual by the theories and to analyse more broad audience of problems in a complex, with unified stands, as one whole. Began possible in a full volume to conduct calculations response of physical properties of an arbitrary flake the semiconductor on effect a component of gas medium, for arbitrary case is exact calculate a position of a Fermi level, surface potential, conductivity etc. Outcomes of activity have principled value not only for the scientific employees, which one work in branch of a gas analysis, and for the physic-chemists, which one are engaged in problems of a catalysis and kinetics heterogenous reactings, bat for all specialists, whose activity is connected with by mining of fundamental theory of semiconducting sensors and actuators and with problems of their mathematical modelling.

For practice it is important, that the theory, offered the writers, is trusted to in the basis Application package «Micron», which one is oriented on the solution standard problems of designing of sensors of gas, temperature and solar elements and on fulfilment of computing experiment at a stage research works.

УМОВНІ ПОЗНАЧЕННЯ

- n_r^-, n_r^+ — найбільший від'ємний та найбільший додатній заряди часток r -сорту;
- n_α^-, n_α^+ — найбільший від'ємний та найбільший додатній заряди часток α -сорту;
- c_{rj}, c_{r0} — концентрації часток домішкових центрів r -сорту у від'ємно (акцептори), додатньо (донори) зарядженому стані та в нейтральному стані, відповідно;
- c_r — повна концентрація домішкових центрів r -сорту;
- $N_{\alpha j}, N_{\alpha 0}$ — поверхневі концентрації часток α -сорту у від'ємно (акцептори), додатньо (донори) зарядженому стані та в нейтральному стані, відповідно;
- N_α — повна концентрація поверхневих електронних станів α -сорту;
- V_O, V_M — вакансії аніону та катіону, відповідно;
- O_i, M_i — міжвузлові атоми аніону та катіону, відповідно;
- X_{rj} — домішка заміщення кисню;
- Y_{rj} — домішка заміщення металу;
- Z_{rj} — домішка інтродукції (проникнення);
- $G_{\alpha j}$ — ідеальний електро-хімічно активний газ;
- $\Pi_{\alpha j}$ — ідеальний поверхневий електронний стан;
- $T_{\alpha j}$ — каталізатор;
- (s) — індекс поверхні;
- (v) — індекс об'ємної фази;
- $J_{rj}^A, J_{rj}^D, J_{r0}$ — потоки часток домішкових центрів r -сорту у від'ємно (акцептори), додатньо (донори) зарядженому стані та в нейтральному стані, відповідно;
- $J_{\alpha j}^A, J_{\alpha j}^D, J_{\alpha 0}$ — потоки часток α -сорту у від'ємно (акцептори), додатньо (донори) зарядженому стані та в нейтральному стані, відповідно;
- \dot{e}_{cj} — компонента швидкості обміну зарядом домішкового центру r -сорту в j -му зарядовому стані із зоною провідності чи з валентною зоною напівпровідника;
- $\dot{r}_{\alpha 0}$ — компонента швидкості хімічних реакцій часток домішкових центрів α -сорту в нейтральному зарядовому стані;
- $\dot{V}_{\alpha r}$ — компонента швидкості міжфазних хімічних реакцій часток r -сорту та α -сорту в нейтральному зарядовому стані;
- \dot{S}_α — компонента швидкості фізичної адсорбції;

N^* — загальна кількість адсорбційних центрів;
 p_α — парціальний тиск молекул газу α -сорту;
 k_α^A, k_α^D — константи адсорбції та десорбції;
 k_{rj}^e, k_{rj}^h — ймовірність захоплення за одиницю часу домішковим центром r -сорту j -го електрона чи дірки;
 $k_{\alpha j}^e, k_{\alpha j}^h$ — ймовірність захоплення за одиницю часу поверхневим електронним станом α -сорту j -го електрона чи дірки;
 g_{rj}^e, g_{rj}^h — ймовірність екстракції за одиницю часу домішковим центром r -сорту j -го електрона чи дірки;
 $g_{\alpha j}^e, g_{\alpha j}^h$ — ймовірність екстракції за одиницю часу поверхневим електронним станом α -сорту j -го електрона чи дірки;
 ξ_r — повний вклад в об'ємний заряд домішкових центрів r сорту;
 f_{rk} — функція, що визначає ту долю повного числа s домішкових центрів r сорту, яка вміщує рівно k надлишкових електронів, якщо $k < 0$ (акцепторний рівень), чи ту їх частку, якій не вистачає рівно k електронів, якщо $k > 0$ (донорний рівень);
 ξ_α — повний вклад в об'ємний заряд поверхневих електронних станів α -сорту;
 $f_{\alpha k}$ — функція, що визначає ту долю повного числа N_α поверхневих електронних станів α -сорту, яка вміщує рівно k надлишкових електронів, якщо $k < 0$ (акцепторний рівень), чи ту їх частку, якій не вистачає рівно k електронів, якщо $k > 0$ (донорний рівень);
 N_C, N_V — ефективні числа станів у зоні провідності та у валентній зоні, відповідно;
 n, p — рівноважні концентрації електронів та дірок;
 n_i — власна концентрація носіїв заряду;
 m_0 — маса електрону у вакуумі;
 $m_{n(p)}$ — ефективна маса носія заряду (електрону чи дірки);
 $\Phi_{1/2}(\eta)$ — інтеграл Фермі — Дірака;
 E_C, E_V — енергія краю зони провідності та вершини валентної зони;
 F_n, F_p — енергії квазірівнів Фермі для електронів та дірок;
 E_F, E_i — енергії рівня Фермі та середини забороненої зони;
 E_{rj} — енергетичний рівень домішкового центру r -сорту в j -зарядовому стані;
 $E_{\alpha j}$ — енергетичний рівень поверхневого електронного стану α -сорту в j -зарядовому стані;
 Φ_0 — рівень хімічного потенціалу;

Φ_n, Φ_p — квазірівні Фермі (потенціали квазірівнів Фермі) для електронів та дірок;
 ψ_0, ψ_S — електростатичний потенціал середини забороненої зони в об'ємі та на поверхні;
 ψ — електростатичний потенціал середини забороненої зони;
 ϕ — електростатичний потенціал у традиційній системі відліку;
 ϕ_n, ϕ_p — квазіпотенціали Фермі для електронів та дірок;
 Y — безрозмірний вигин зон у даній точці;
 V — обернений електростатичний потенціал;
 u — безрозмірний обернений електростатичний потенціал;
 λ — рівень легування;
 q — елементарний електричний заряд;
 k — стала Больцмана;
 T — абсолютна температура;
ОПЗ — область просторового заряду;
ЧЕ — чутливий елемент;
ТД — точковий дефект.

Глава I

ФЕНОМЕНОЛОГІЧНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ СИСТЕМИ ГАЗ — НАПІВПРОВІДНИК

РОЗДІЛ 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ МОДЕЛЮВАННЯ

1.1. Про технологію математичного моделювання

У широкому розумінні моделювання, як метод наукового пізнання, зводиться до виділення об'єкта моделювання з навколишнього середовища на основі інформації, що надходить від нього, та побудови деякої системи-моделі (другої системи), зв'язаної із системою-оригіналом (першою системою) певними співвідношеннями відповідності [1–7].

Таке відображення одного об'єкту в інший, отримують у вигляді певного набору залежностей між ними, відображеного у співвідношеннях подібності. Воно дає змогу на відповідних стадіях пізнавального процесу заміщати оригінал його моделлю та отримувати знання про сам об'єкт на основі вивчення власне моделі.

З цих позицій розрізняють натурне та математичне моделювання [3]. У першому випадку моделювання проводять на матеріальній моделі. Відображаючи об'єкт, вона зберігає нерідко і його фізичну природу. Таку модель (макет), як правило, виконують у спрощеному вигляді та зміненому масштабі і вона є об'єктом натурального експерименту.

При математичному моделюванні реальному фізичному об'єкту ставиться у відповідність його математична модель, яка будується на основі символічних математичних об'єктів — чисел, векторів, співвідношень між ними тощо [8]. Математична модель є об'єктом обчислювального експерименту із застосуванням електронно-обчислювальної техніки. Такий експеримент є найбільш гнучким, найбільш ефективним та найбільш інформативним.

Відомі два осовних методи побудови математичних моделей — на основі вивчення закономірностей, що визначають природну суть досліджуваного об'єкта, та на основі експериментально-статистичних методів [9].

Зупинимося більш детально на особливостях першого методу. Йому на сьогоднішній день надають порівняно мало уваги, оскільки він гірше піддається формалізації — тут більше «ручної праці», багато визначає суб'єктивний фактор. Його

незаперечна перевага полягає в тому, що отримувані таким чином математичні моделі більш повно і в більш широкому діапазоні адекватно відображають властивості об'єкта дослідження. Результируючі математичні моделі іноді називають фізичними — підкреслюючи, що при створенні формалізованого опису враховано фундаментальні закономірності природи.

Характерна особливість методу полягає в тому, що тут важливу роль відіграє принцип інформаційної достатності. Існує деякий критичний рівень теоретичних та експериментальних відомостей про об'єкт дослідження, при досягненні якого може бути побудована адекватна модель. Хоча цей метод і дає змогу відкрити обшивку «чорного ящика», але й працює лише тоді, коли реалізація такої операції історично можлива, тобто, коли цьому сприяє сучасний рівень науково-технічного прогресу.

У даному викладі ми презентуємо апробовану нами реалізацію методу побудови математичних моделей технічних об'єктів, запропоновану в роботі [10] як системний підхід до моделювання. Суть його полягає в такому. На основі аналізу даних про призначення, конструкцію, технологію виготовлення та умови експлуатації досліджуваного об'єкта, визначають основну і допоміжні цілі моделювання. Для кожної зі сформульованих цілей моделювання, виконують відповідну **постановку задачі**. Досліджуваний об'єкт розглядають як підсистему деякої метасистеми, тобто системи більш високого рангу.

Черговий крок — виокремлення об'єкта моделювання із зовнішнього середовища. Визначають, які елементи належать системі, а які є зовнішніми. Таке виокремлення проводять шляхом послідовного переходу від загального до часткового із врахуванням поставленої цілі моделювання та залежного від неї рівня абстрагування. Власне виконують **декомпозицію системи** на елементарні компоненти. У результаті вирізняють:

- сукупність основних елементів, які задають склад об'єкта моделювання;
- вектор вхідних збурень, які характеризують основні співвідношення між зовнішнім середовищем і об'єктом моделювання;
- вектор вихідних величин, який описує ті реакції об'єкта моделювання, що цікавлять дослідника.

Також формулюють та обґрунтовують основні спрощуючі допущення та гіпотези, прийняті на цьому кроці побудови моделі.

Далі проводять смисловий опис об'єкта моделювання, тобто розробляють **концептуальну модель**. Концептуальна модель —

це абстрактна модель, яка визначає структуру об'єкта моделювання як системи, властивості елементів цієї системи та причинно-наслідкові зв'язки між елементами, що наявні у системі та істотні для досягнення цілі моделювання. Основне її призначення — охарактеризувати концептуально взаємозв'язки між виокремленими елементами об'єкта моделювання, а також між змінними, які характеризують його стан. Для вирішення цього питання використовують відомі на даний момент досягнення теорії та висовують гіпотези і припущення, які дають змогу кількісно описати відповідні залежності.

Після цього проводять **формалізацію задачі**: приймають заключну систему вихідних гіпотез і припущень, вибирають конкретні апроксимації елементів моделювання, будують його формалізовану схему, і вже на цій основі виконують запис у математичній формі всіх співвідношень, надають аналітичного вигляду всім логічним умовам тощо. У результаті отримують сукупність математичних об'єктів і співвідношень між ними, що описують внутрішній стан об'єкта моделювання, зовнішні збурення і вихідні сигнали, тобто власне шукану **математичну модель**.

Питання **повноти** математичної моделі вирішується на основі альтернативних критеріїв коректності та мінімальності. Вважають, що математична модель *коректна*, якщо:

а) ускладнення її за рахунок неврахованих процесів не веде до якісних змін досліджуваних характеристик об'єкта моделювання;

б) повна система вихідних припущень, застосованих при побудові моделі, складається з несуперечливих тверджень.

Під *мінімальною* розуміють таку математичну модель, виключення з якої будь-якого з раніше врахованих процесів веде до якісної зміни характеристик моделі а, відповідно, і до її неадекватності.

Як правило, отримувана таким чином математична модель досить складна для безпосередньої роботи з нею як аналітичними, так і чисельними методами. Традиційним підходом [6], який широко застосовується на практиці, є редукція вихідного математичного опису до вигляду, основаної на впливаючих зі специфіки задачі, системи спрощуючих допущень, ієрархічної послідовності більш економних моделей, аж до таких, що дозволяють аналітичне рішення. Реалізується можливість застосування однієї з таких груп методів:

1) *аналітичні*, що дають змогу отримувати явні залежності для шуканих характеристик;

2) *чисельні*, коли аналітично розв'язок неможливий, а отримують числові результати за конкретних вихідних даних;

3) *якісні*, коли не маючи розв'язків в явному вигляді, шукають деякі їх (розв'язків) властивості (наприклад, оцінюють стійкість розв'язків).

Слід врахувати, що проста модель в одних випадках може дати достатньо точне наближення для більш складної постановки задачі, а в інших — і достатньо точне наближення до шуканого результату. З іншого боку, у межах більш повних моделей можна:

- врахувати складніші ефекти й отримати більш точне рішення;
- оцінити похибку, що вноситься при редукції вихідного математичного опису до спрощеної постановки задачі;
- оцінити діапазон застосування рішення, отриманого на спрощеній моделі.

Таблиця 1.1

Концептуальна модель: стехіометричні власні крапкові дефекти у сполуці M_gO_k згідно із П. Кофстад [14]

Тип неупорядкованості у кристалі M_gO_k	За Шотткі	За Френкелем
Характерні особливості типу:	вакансії аніонів та катіонів	однотипні ТД: вакансії та міжвузлові іони
Квазіхімічні реакції виникнення нейтральних ТД:	$L \leftrightarrow q \cdot V_M^x + k \cdot V_O^x$	$M_M \leftrightarrow M_i^x + V_M^x$; $O_o \leftrightarrow O_i^x + V_o^x$
Закон діючих мас:	$[V_M^x]^q \cdot [V_O^x]^k = k_s$	$[M_i^x] \cdot [V_M^x] = k_{FM}$; $[O_i^x] \cdot [V_O^x] = k_{FO}$
Критерій виникнення нейтральних ТД:	зіставні розміри катіонів та аніонів сполуки	істотно відмінні розміри катіонів та аніонів сполуки
Місце утворення ТД та особливості їх поведінки:	зовнішні та внутрішні поверхні, дислокації; дифузія у кристал	у довільній точці в об'ємі кристалу
Особливості фазової рівноваги сполуки із паром:	молекули чи групи атомів переходять у газову фазу так, що відхилення різних вузлів кристалічної решітки точно відповідає стехіометричному складу сполуки	

Підсумовуючи сказане, перелічимо основні етапи технології математичного моделювання:

- 1) визначення цілі моделювання;
- 2) постановка задачі моделювання;
- 3) декомпозиція системи;
- 4) розробка концептуальної моделі;
- 5) формалізація задачі і отримання математичної моделі;
- 6) підготовка моделі до обчислювального експерименту;
- 7) реалізація плану обчислювального експерименту;
- 8) перевірка адекватності моделі;
- 9) аналіз та інтерпретація результатів моделювання;
- 10) оцінка повноти моделі.

Таблиця 1.2

Концептуальна модель: нестехіометричні власні крапкові дефекти у сполуці M_gO_k згідно із П. Кофстад [14]

	Тип відхилення від стехіометрії			
	Дефіцит кисню		Дефіцит металу	
Умови утворення	Нестача кисню	Надлишок металу	Нестача металу	Надлишок кисню
Домінуючі КД	V_o	M_i	V_m	O_i
Формула окислу	M_gO_{k-x}	$M_{g+y}O_k$	$M_{g-y}O_k$	M_gO_{k+x}
Тип провідності	n	n	p	p
Місце генерації та анігіляції	Поверхня поділу фаз типу окисел металу — зовнішнє середовище (газова фаза, вищий або нижчий окисел тощо)			

1.2. Концептуальна модель

Матеріал чутливого елементу напівпровідникового сенсора газу за робочих температур являє собою напівпровідниковий іонний полікристал. Специфікою напівпровідникового матеріалу є залежність його параметрів від рівня легування в об'ємі матеріалу (рівня Фермі) та від поверхневого вигину зон (поверхневого потенціалу) [24]. Рівень легування та поверхневий потенціал визначаються величиною парціального тиску вимірюваного активного газу.

Датчики **поверхневого** типу. Дисоціативно хемосорбуючись на поверхні металоокисного напівпровідника, атмосферний

кисень проявляє акцепторні властивості. Від'ємно заряджені фракції хемосорбованого кисню формують негативну компоненту поверхневого заряду. В алгебраїчній сумі з наявним на поверхні біографічним зарядом вони визначають поверхневий заряд певного знака.

Поверхневий заряд екранується (закон парності зарядів) у приповерхневому регіоні областю просторового заряду (ОПЗ). Формується подвійний шар, який визначає величину та знак поверхневого потенціалу. За робочих умов результуючий поверхневий заряд негативний, а виникаючий в ОПЗ шар традиційно є шаром збіднення.

Газ, концентрація якого вимірюється, хемосорбується на поверхні напівпровідника та вступає в гетерогенно-каталітичну поверхневу реакцію окислення поверхневими радикальними формами кисню, унаслідок чого:

- виникає відповідна форма (акцепторна чи донорна) хемосорбованих фракцій газу (результат хемосорбції);
- змінюється поверхнева концентрація фракцій хемосорбованого кисню (результат поверхневої реакції);
- змінюється поверхнева концентрація заряджених фракцій поверхневих дефектів (результат поверхневої реакції);

Як наслідок, у першу чергу змінюється величина поверхневого заряду та поверхневого потенціалу.

За достатньо високих температур концентрації поверхневих та об'ємних дефектів знаходяться у стані термодинамічної рівноваги. Зникнення чи утворення наявних на поверхні точкових дефектів викликає відповідну зміну їх концентрації у приповерхневому шарі. Виникаючи у поперечному перерізі елементу структури матеріалу ЧЕ градієнти концентрації крапкових дефектів шляхом дифузії ведуть до встановлення нових рівноважних значень об'ємного заряду. Унаслідок цього отримуємо нове рівноважне положення рівня Фермі.

Зміна концентрацій поверхневих фракцій дефектів, викликає зміну їх концентрацій в об'ємі. Відбувається зміна положення рівня Фермі по всьому поперечному перерізу елементу структури матеріалу ЧЕ.

Модифікація властивостей сенсора добавками (**легування**) впливає:

- або на поверхневий заряд (змінюючи поверхневий потенціал);
- або на об'ємний заряд (змінюючи положення рівня Фермі);
- або на обидва види заряду одночасно.

Сегрегація на поверхню об'ємних домішок [17] визначає їх одночасний вплив як на поверхневий, так і на об'ємний заряд. Так само, як і *розчинення в об'ємі* нанесених на поверхню домішок.

Датчики **дифузійного** типу працюють лише на залежності рівня Фермі від парціального тиску вимірюваного газу.

РОЗДІЛ 2. ФОРМАЛІЗАЦІЯ ЗАДАЧІ

Важливим напрямом розвитку мікроелектроніки на сучасному етапі є широке застосування напівпровідникових сенсорів — по суті, органів чуття сучасних технічних об'єктів. У сенсорах температури та сенсорах концентрації газу, використовують для цього нетрадиційні для цієї галузі матеріали — полі- та монокристали (останнім часом це плівки та нитковидні кристали) окислів металів, математичний опис яких потребує подальшого пророблення. А тому актуальною є задача створення математичної моделі металоокисного напівпровідника, достатньо детально і в рамках єдиної концепції враховуючої порівняно широкий спектр факторів, істотних для застосування таких матеріалів як чутливого елемента для температурних та газових сенсорів.

Таблиця 1.3

Концептуальна модель: електрофізична структура напівпровідникового окислу металу згідно із П. Кофстад [14]

Компонент	Тип крапкових дефектів (КД)			
	Вакансії компонент сполуки		Міжвузлові атоми компонент сполуки	
	Метал	Кисень	Метал	Кисень
1	2	3	4	5
Позначення	V_m	V_o	M_i	O_i
Знак заряду іонів	-	+	+	-
Очікуваний максимальний заряд	$2k/q$	2	$2k/q$	2

Закінчення табл. 1.3

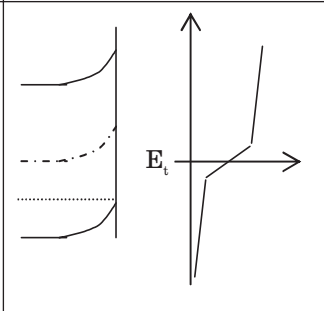
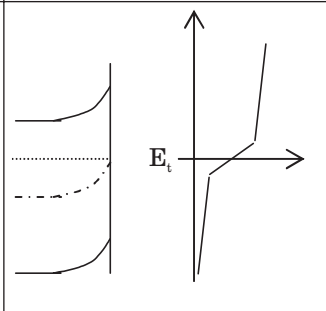
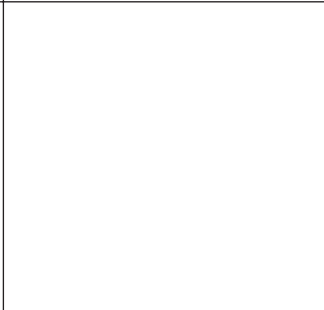
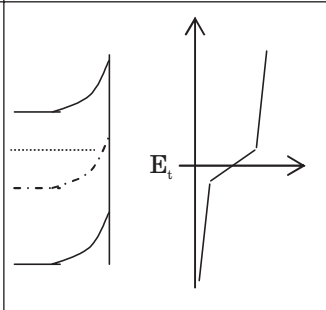
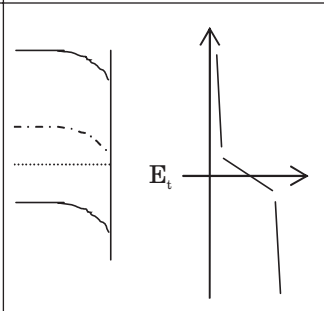
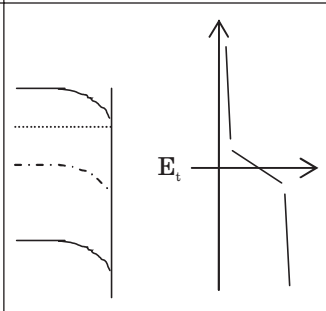
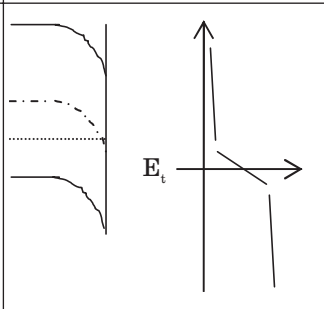
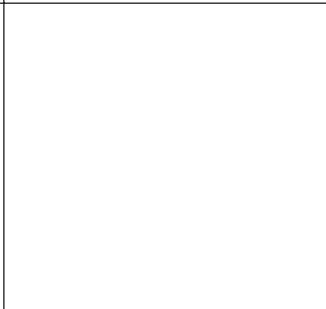
1	2	3	4	5
Механізм виникнення КД у сполуці згідно із П. Кофстад	Реакція з киснем $k \cdot \frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow q \cdot V_M + k \cdot O_O$	Перенесення атомів кисню з вузлів КР в ГФ $O_O \leftrightarrow V_O^X + \frac{1}{2}O_2$	Перенесення атомів кисню з вузлів КР в ГФ, а атомів металу — в міжвузля $M_q O_k \leftrightarrow q M_i^X + \frac{k}{2} O_2$	Реакція з киснем $\frac{1}{2}O_2 \leftrightarrow O_i^X$
Наявність модифікації вузлів кристалічної решітки	З'являються нові q катіонних та k аніонних вузлів у структурі	Не змінюється число вузлів	Зменшується число катіонних та аніонних вузлів	Не виникають нові вузли решітки

Таблиця 1.4

Концептуальна модель: зонні діаграми у хемосорбції

Тип відхилення від стехіометрії в окислі		Дефіцит катіонів (p -тип) $\lambda > 1$	Дефіцит аніонів (n -тип) $\lambda < 1$
1	2	3	4
ПЕС відсутні	$Q_{SS} = 0$		

Закінчення табл. 1.4

1	2	3	4
<p>Акцепторні ПЕС — екстракція електронів. Адсорбат — сильний</p>	<p>$Q_{SS} < < 0$</p>		
<p>окислювач (висока спорідненість до електрона)</p>	<p>Інверсія</p>		
<p>Донорні ПЕС — інжекція електронів. Адсорбат — сильний</p>	<p>$Q_{SS} > > 0$</p>		
<p>відновлювач (низька енергія іонізації)</p>	<p>Інверсія</p>		

Таблиця 1.5

**Класифікація типів структур напівпровідникових плівок
та моделі, що їх апроксимують**

Тип структури плівки	Апроксимуюча модель
Аморфна плівка (ближній порядок)	Математичний апарат теорії не-впорядкованих систем (Мотт, Бонч-Бруєвич тощо)
Випадково орієнтований полікристал	Сферичне зерно
Орієнтований в одному напрямку полікристал (у напрямку росту плівки)	Циліндричне зерно чи зерно у формі прямокутного паралелепіпеда
Однорідно орієнтований полікристал	Нескінченна пластина
«Ажурна» сітка	Нескінченна пластина із симетричними граничними умовами

Таблиця 1.6

**Види функцій розподілу
енергетичних рівнів поверхневих станів
та аналітичні співвідношення, що їх формалізують**

Вид функції розподілу енергетичних рівнів поверхневих станів	Аналітичне співвідношення
Дискретна	$N_{SS}(E) = N_{SS} \delta(E - E_{SS})$
Рівномірна	$N_{SS}(E) = N_{SS}$ $E_V = E = E_C$
Гаусева	$N_{SS}(E) = N_{SS} \exp \left\{ -\frac{(E_{SS} - E)^2}{(kT)^2} \right\}$
Експоненційна	$N_{SS}(E) = N_{SS} \exp \left\{ -\frac{E_C - E_{SS}}{kT} \right\}$

2.1. Формалізація макроструктури металу

Поверхня масивного напівпровідника — це межа двох фаз: газової фази та напівпровідникового кристала. Вона взаємодіє як з молекулами газової фази, так і з носіями електричного заряду об'ємної фази напівпровідникового кристала, являючи собою самостійний об'єкт. Глобально у задачі наявні три макрокомпо-

ненти: газова фаза, межа фаз (поверхня напівпровідника), кристалічна решітка (напівпровідниковий кристал).

У випадку застосування в каталізі та газовому аналізі дисперсних структур задача децю ускладнюється, внаслідок наявності у зразках різних типів поверхні. Оскільки макроструктуру монокристалічних шарів можна вважати частковим випадком полікристалічного зразка, обмежимося розглядом полікристала.

У полікристалічних матеріалах розрізняють три типи поверхонь [1]:

- 1) міжфазну межу твердого тіла з газовою фазою — гетероперехід;
- 2) міжфазну межу твердого тіла з іншим твердим тілом (керамічною основою, металевим контактом тощо) — гетероперехід;
- 3) межу між сусідніми кристалічними фазами даного матеріалу — гомоперехід.

Сам полікристал розглядають як сукупність наділених довершеною кристалічною решіткою окремих зерен, обмежених такими поверхнями. Властивості власне зерен вважають повністю тотожними об'ємним властивостям масивних зразків, що мають упорядковану кристалічну структуру.

Мінімальне число атомів, за якого виправданий цей підхід, повинне перевищувати таку їх кількість, за якої отримувана на основі квантово-механічних розрахунків енергія орбіталей та енергія зв'язків адсорбат — адсорбент перестає істотно змінюватися [1.45]. Це відповідає характеристичному розміру зерна порядку $4 \cdot 10^{-8}$ м.

При моделюванні міжфазних меж будемо наслідувати підхід Дж. В. Гіббса [2]. Кожну величину, що характеризує поверхневі властивості, визначають як різницю макроскопічних величин для реального твердого тіла з реальною релаксованою та реконструйованою поверхнею та гіпотетичного твердого тіла з ідеальною поверхнею.

Можливі варіанти моделей макроструктури матеріалу ЧЕ зображені на рис. 1.1 та рис. 1.2 відповідно. Перша є розвитком відомої моделі Фішера [3], а друга — власне термодинамічною [2]. В обох моделях кожна із фаз відділяється одна від одної різкою межею — нескінченно-тонкою однорідною площиною (двовимірним простором), з якою і пов'язуються властивості межі фаз, які цікавлять дослідника.

Відмінність полягає у тому, що в першій з них по периметру межі поділу твердих фаз виділяється додатково однорідна просторово-розподілена область (деяка проміжна фаза) завширшки

$\delta = 2a$. Звичайно вважають [1.38], що вона не залежить від температури та дорівнює 0,5 нм. Інакше кажучи, тут межа поділу фаз «тверде тіло — тверде тіло» (ТТ–ТТ), ніби розщеплюється на два компоненти: площину поділу фаз (наприклад, площина міжзернових меж (МЗМ) та область межі поділу фаз (наприклад, область МЗМ).

2.2. Декомпозиція потоків

Кожна з наведених вище моделей геометрії макроструктури матеріалу ЧЕ дає змогу постулювати в ній свій механізм переносу речовини.

Для першої моделі (див. рис. 1.1) покладаємо: а) у межах кожної із фаз молекули газу переносяться без хімічної взаємодії між собою; б) поверхнева реакція локалізована виключно у площинах поділу фаз; в) в областях міжфазної межі типу ТТ–ТТ речовина переноситься виключно шляхом зернограничної дифузії.

Аналогічно для другої моделі (див. рис. 1.2) перші два пункти приймаються без змін, а третій формулюється так: в) інградієнти поверхневої реакції переносяться у площинах поділу фаз «тверде тіло — газова фаза» (ТТ–ГФ) шляхом поверхневої дифузії, а у площинах поділу фаз ТТ–ТТ — шляхом зернограничної дифузії.

На обох малюнках допускається, що взаємодія з газовим середовищем відбувається лише на зовнішніх поверхнях, паралельних горизонтальній осі, а чільні зовнішні поверхні ізольовані. Площини поділу фаз як ТТ–ГФ так і ТТ–ТТ інтерпретуються аналогічно тому, як це має місце у межах теорії Ленгмюра.

2.3. Гіпотези та припущення

Для кращого розуміння наступних викладок обмежимо коло описуваних явищ, покладаючи додатково до обумовлених вище припущень, таке: 1) характеристичні розміри L_{\max} елементів структури напівпровідника значно менші, ніж довжина хвилі протікаючого у ньому струму λ_{\min} , тобто для електричного поля в напівпровіднику справедливе квазістаціонарне наближення [4]; 2) на дебройлевській довжині хвилі електрону зміна потенціалу значно менша, ніж kT/q , тобто розмірним квантуванням можна знехтувати; 3) відстань між зарядженими шарами значно перевищує відстань між точковими зарядами усередині самих шарів, або ж усередині шарів існує перекриття орбіталей, так що виправданий опис у межах моделі однорідного шару — тобто поверхня може бути охарактеризована усередненим значенням електростатичного потенціалу, нехтуючи

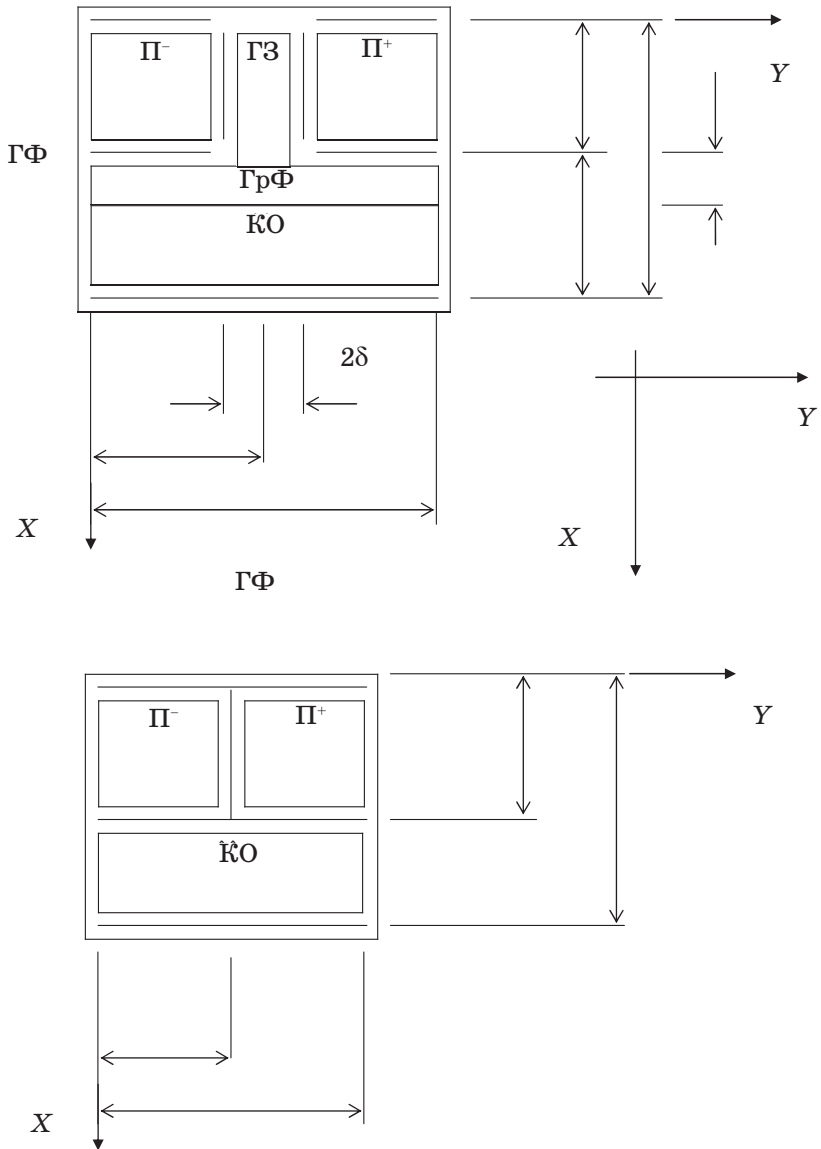


Рис. 1.1. Модель макроструктури металоокисного напівпровідника:
 1) варіант № 1; 2) варіант № 2. Тут: ГрФ — границя фаз;
 ГЗ — границя зерен; КО — основа; П — регулярний
 напівпровідник; ГФ — газова фаза

природною неоднорідністю поверхні; 4) величина пружних деформаційних полів, що виникають унаслідок різниці в коефіцієнтах теплового розширення матеріалів, дуже малі — так що ними можна знехтувати (забезпечується конструкційними та технологічними заходами); 5) температурне поле у будь-якому перерізі структури базової моделі ізотропне; 6) область міжфазної межі ТТ–ТТ у випадку моделі, представленої на рис. 1.1, являє собою діелектрик, причому об'ємна густина заряду в ньому дорівнює ρ_{DE} ; 7) контакти метал — напівпровідник — омічні.

Для опису масопереносу квазічасток (вакансії) та часток речовини (як в об'ємі, так і на поверхні) справедливі такі припущення: 1) має місце наближення ідеального розчину (без заміщення), а явища преципітації та кластеризації [5] домішок відсутні; 2) виконується принцип незалежності реакцій — хімічні реакції у системі протікають із помірними швидкостями, не викликаючи порушення закону розподілу молекул за швидкостями, а властивості середовища внаслідок виникнення продуктів реакції помітно не змінюються; 3) матеріал власне чутливого елементу являє собою бінарну сполуку типу M_qO_k , в якому можуть бути присутні власні вкраплені дефекти V_o , V_m , O_i , M_i (вакансії й міжвузельні атоми компонент сполуки) та легуючі домішки (домішки заміщення та домішки проникнення); 4) справедливі припущення теорії фізичної адсорбції Ленгмюра; 5) хемосорбція являє собою одну з можливих гілок перебігу поверхневої гетерогенної реакції з участю фізично адсорбованих часток (квазіхімічну реакцію фізично адсорбованих часток з носіями заряду відповідних зон напівпровідника); 6) десорбція хемосорбованої частки можлива лише в нейтральному стані.

Гетерогенна поверхнева реакція включає такі компоненти: 1) у газовому середовищі присутні кисень O_2 , водень H_2 , пари води H_2O , яким на поверхні відповідають наступні іонсорбовані форми: O_2^- , O^- , O^{2-} , H^+ , OH^- ; 2) наявні $v_1 - v_0 = w_1 - w_0$ та $v_2 - v_1 = w_2 - w_1$ речовин, що розчиняються в решітці напівпровідника з утворенням домішок заміщення атомів кисню та металу, відповідно; 3) наявні $v_3 - v_2 = w_3 - w_2$ домішок проникнення (інтродукції) у міжвузля кристалічної фази; 4) кожна з різновидностей домішок здатна утворювати амфотерні кратнозарядні стани; 5) на поверхні окислу міститься $w_4 - w_3$ стійких нелетючих, нерозчинних в об'ємі речовин, що створюють амфотерні кратнозарядні поверхневі електронні стани; 6) у газовому середовищі наявні також $w_5 - w_4$ інертних газів G_u та $w_6 - w_5$

хімічно не реагуючих газів G_x , що хемосорбуються з виникненням амфотерних кратнзарядних поверхневих електронних станів.

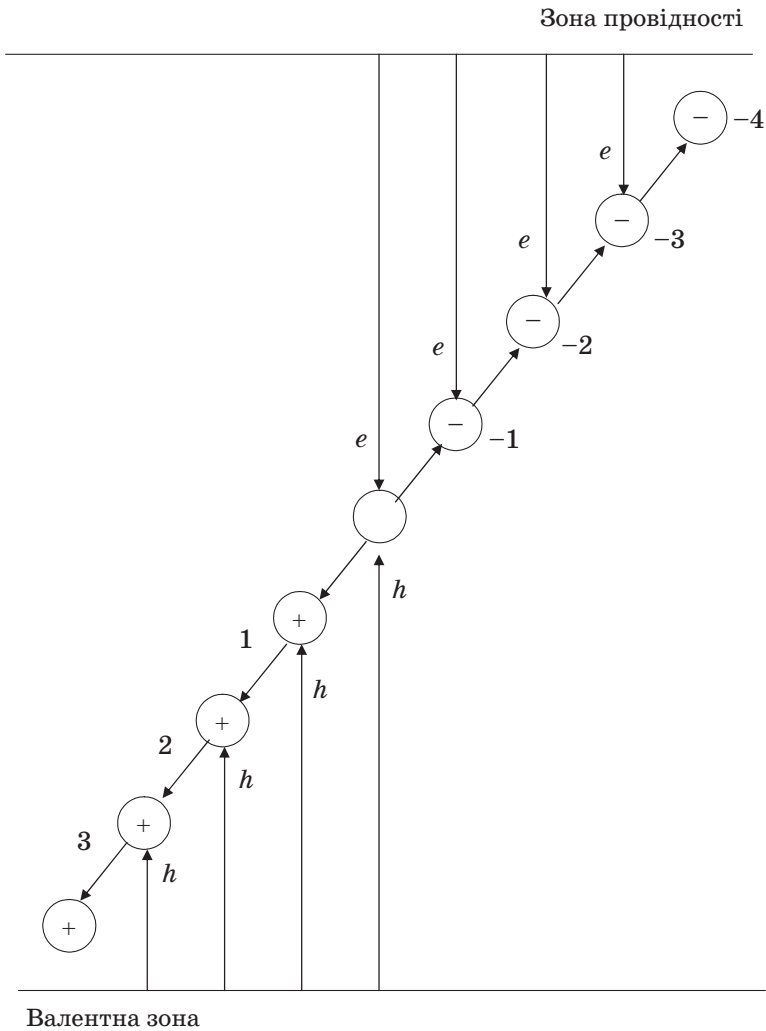


Рис. 1.2. Схема обміну зарядом амфотерного домішкового центру r -сорту із зоною провідності та з валентною зоною напівпровідника. Максимальний додатній заряд $+4$, максимальний від'ємний заряд -4

Акцепторна та донорна форма іонів в об'ємі та на поверхні розглядаються як часткові випадки. Хемосорбцію відновлювальних газів R , парів вуглеводів $E(C, H)$, парів спиртів $A(C, H, OH) = C_nH_{2n+1}OH$ розглянемо ситуативно, оскільки відсутні достовірні експериментальні дані.

Роль каталізатора, нанесеного на поверхню окислу металу, полягає в наступному: 1) каталізатор володіє спорідненістю (фізичною чи хімічною) до одного чи декількох реагентів, створюючи з його компонентами проміжні сполуки; 2) проміжні сполуки нестійкі, лабільні, легко розпадаються на знову готовий до дії каталізатор та на компоненти речовини реагенту, які більш реакційноздатні, ніж цей самий реагент у вихідному стані; 3) ступінь дисперсності каталізатора визначає його вплив на величину поверхневого заряду: чи має місце контакт тверде тіло — тверде тіло — гетероперехід, чи ж виникають відповідні поверхневі електронні стани.

У першому випадку (контакт тверде тіло — тверде тіло) ситуація визначається співвідношенням між роботою виходу електрона з поверхні каталізатора та роботою виходу електрона з поверхні адсорбента. У другому випадку (поверхневі електронні стани) — природою поверхневих електронних станів, яка визначає положення відповідних енергетичних рівнів у забороненій зоні напівпровідника (спорідненістю до електрону чи до дірки).

РОЗДІЛ 3. СИСТЕМА РІВНЯНЬ МАТЕРІАЛЬНОГО БАЛАНСУ

Відповідно до прийнятої системи гіпотез і припущень та застосовуючи принцип детальної рівноваги, запишемо рівняння матеріального балансу хімічних та квазіхімічних реакцій, що протікають у матеріалі чутливого елемента.

3.1. Реакції на межі поділу фаз

$$O_{2g} + S = O_{2S};$$

$$O_{2S} = 2O_S;$$

$$O_{2S} + 2T_S = 2\{T - O\}_S;$$

$$\{T - O\}_S = T_S + O_S;$$

$$H_{2g} + S = H_{2S};$$

$$H_{2S} = 2H_S;$$

$$H_{2S} + 2T_S = 2\{T : H\}_S;$$

$$\{T : H\}_S = T_S + H_S;$$

$$(H_2O)_g + S = (H_2O)_S;$$

$$(H_2O)_S = H_S^+ + (OH^-)_S;$$

$$H_S + O_S^- = (OH^-)_S;$$

$$M_g + S = M_S;$$

$$O_{2S} + e = O_{2S}^-;$$

$$O_S + e = O_S^-;$$

$$O_S^- + e = O_S^{2-};$$

$$(OH)_S + e = (OH^-)_S;$$

$$H_S + h = H_S^+;$$

$$V_{OS} + h = V_{OS}^+;$$

$$V_{OS}^+ + h = V_{OS}^{++};$$

$$M_{OS} + h = M_{OS}^+;$$

$$M_{OS}^+ + h = M_{OS}^{++};$$

...

$$M_{OS}^{(2k/q-1)+} + h = M_{OS}^{(2k/q)+};$$

$$V_{MS} + e = V_{MS}^-;$$

$$V_{MS}^- + e = V_{MS}^{--};$$

...

$$V_{MS}^{(2k/q-1)-} + e = V_{MS}^{(2k/q)-};$$

$$X_{\alpha g} + S = X_{\alpha S}^0; \alpha = w_0 + 1, w_1;$$

$$X_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^-+1)-} + e = X_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^-)-};$$

...

$$X_{\alpha S}^{(j)-} + e = X_{\alpha S}^{(j-1)-};$$

$$X_{\alpha S}^{(j+1)-} + e = X_{\alpha S}^{(j)-};$$

$$X_{\alpha S}^{(j+2)-} + e = X_{\alpha S}^{(j+1)-};$$

...

$$X_{\alpha S}^0 + e = X_{\alpha S}^-;$$

$$X_{\alpha S}^0 + h = X_{\alpha S}^+;$$

...

$$X_{\alpha S}^{(j-2)+} + h = X_{\alpha S}^{(j-1)-};$$

$$X_{\alpha S}^{(j-1)+} + h = X_{\alpha S}^{(j)+};$$

$$X_{\alpha S}^{(j)+} + h = X_{\alpha S}^{(j+1)+};$$

...

$$X_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^- - 1)+} + h = X_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+)+};$$

$$Y_{\alpha g} + S = Y_{\alpha S}^0; \quad \alpha = \overline{w_1 + 1, w_2};$$

$$Y_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^- + 1)-} + e = Y_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^-)-};$$

...

$$Y_{\alpha S}^{(j)-} + e = Y_{\alpha S}^{(j-1)-};$$

$$Y_{\alpha S}^{(j+1)-} + e = Y_{\alpha S}^{(j)-};$$

$$Y_{\alpha S}^{(j+2)-} + e = Y_{\alpha S}^{(j+1)-};$$

...

$$Y_{\alpha S}^0 + e = Y_{\alpha S}^-;$$

$$Y_{\alpha S}^0 + h = Y_{\alpha S}^+;$$

...

$$Y_{\alpha S}^{(j-2)+} + h = Y_{\alpha S}^{(j-1)+};$$

$$Y_{\alpha S}^{(j-1)+} + h = Y_{\alpha S}^{(j)+};$$

$$Y_{\alpha S}^{(j)+} + h = Y_{\alpha S}^{(j+1)+};$$

...

$$Y_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+ - 1)+} + h = Y_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+)+};$$

$$Z_{\alpha g} + S = Z_{\alpha S}^0; \quad \alpha = \overline{w_2 + 1, w_3};$$

$$Z_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^- + 1)-} + e = Z_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^-)-};$$

...

$$Z_{\alpha S}^{(j)-} + e = Z_{\alpha S}^{(j-1)-};$$

$$Z_{\alpha S}^{(j+1)-} + e = Z_{\alpha S}^{(j)-};$$

$$Z_{\alpha S}^{(j+2)-} + e = Z_{\alpha S}^{(j+1)-};$$

...

$$Z_{\alpha S}^0 + e = Z_{\alpha S}^-;$$

$$\begin{aligned}
& Z_{\alpha S}^0 + h = Z_{\alpha S}^+; \\
\dots & \\
& Z_{\alpha S}^{(j-2)^+} + h = Z_{\alpha S}^{(j-1)^+}; \\
& Z_{\alpha S}^{(j-1)^+} + h = Z_{\alpha S}^{(j)^+}; \\
& Z_{\alpha S}^{(j)^+} + h = Z_{\alpha S}^{(j+1)^+}; \\
\dots & \\
& Z_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+ - 1)^+} + h = Z_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+)^+}; \\
\Pi_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+ + 1)^-} + e &= \Pi_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+)^-}; \alpha = \overline{w_3 + 1, w_4}; \\
\dots & \\
& \Pi_{\alpha S}^{(j)^-} + e = \Pi_{\alpha S}^{(j-1)^-}; \\
& \Pi_{\alpha S}^{(j+1)^-} + e = \Pi_{\alpha S}^{(j)^-}; \\
& \Pi_{\alpha S}^{(j+2)^-} + e = \Pi_{\alpha S}^{(j+1)^-}; \\
\dots & \\
& \Pi_{\alpha S}^0 + e = \Pi_{\alpha S}^-; \\
& \Pi_{\alpha S}^0 + h = \Pi_{\alpha S}^+; \\
\dots & \\
& \Pi_{\alpha S}^{(j-2)^+} + h = \Pi_{\alpha S}^{(j-1)^+}; \\
& \Pi_{\alpha S}^{(j-1)^+} + h = \Pi_{\alpha S}^{(j)^+}; \\
& \Pi_{\alpha S}^{(j)^+} + h = \Pi_{\alpha S}^{(j+1)^+}; \\
\dots & \\
& \Pi_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+ - 1)^+} + h = \Pi_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+)^+}; \\
G_{\alpha g} + S &= G_{\alpha S}^0; \alpha = \overline{w_4 + 1, w_5}; \\
G_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+ + 1)^-} + e &= G_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+)^-}; \\
\dots & \\
& G_{\alpha S}^{(j)^-} + e = G_{\alpha S}^{(j-1)^-}; \\
& G_{\alpha S}^{(j+1)^-} + e = G_{\alpha S}^{(j)^-}; \\
& G_{\alpha S}^{(j+2)^-} + e = G_{\alpha S}^{(j+1)^-}; \\
\dots & \\
& G_{\alpha S}^0 + e = G_{\alpha S}^-; \\
& G_{\alpha S}^0 + h = G_{\alpha S}^+; \\
\dots &
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_{\alpha S}^{(j-2)+} + h &= G_{\alpha S}^{(j-1)+}; \\
G_{\alpha S}^{(j-1)+} + h &= G_{\alpha S}^{(j)+}; \\
G_{\alpha S}^{(j)+} + h &= G_{\alpha S}^{(j+1)+}; \\
\dots \\
G_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+-1)+} + h &= G_{\alpha S}^{(n_{\alpha}^+)+}; \\
(RO)_{\alpha g} + S &= (RO)_{\alpha S}; \\
(R)_{\alpha g} + S &= (R)_{\alpha S}; \\
(RO)_{\alpha S} + e &= (RO)_{\alpha S}^-; \quad \alpha = \overline{w_5 + 1, w_6}; \\
(R)_{\alpha S} + O_S^- &= (RO)_{\alpha S}^-; \\
(C_n H_{2n})_{\alpha g} + S &= (C_n H_{2n})_{\alpha S}; \quad \alpha = \overline{w_6 + 1, w_7}; \\
(C_n H_{2n+2})_{\alpha g} + S &= (C_n H_{2n+2})_{\alpha S}; \\
(C_n H_{2n})_{\alpha S} + H_S^+ &= (C_n H_{2n+1})_{\alpha S}; \\
(C_n H_{2n+1})_{\alpha S} + H_S^+ &= (C_n H_{2n+2})_{\alpha S}^+; \\
(C_n H_{2n+1})_{\alpha S} + h &= (C_n H_{2n+1})_{\alpha S}^+; \\
(C_n H_{2n+2})_{\alpha S} + h &= (C_n H_{2n+2})_{\alpha S}^+; \\
(C_n H_{2n+1} OH)_{\alpha g} + S &= (C_n H_{2n+1} OH)_{\alpha S}; \\
(C_n H_{2n-1} CHO)_{\alpha g} + S &= (C_n H_{2n-1} CHO)_{\alpha S}; \quad \alpha = \overline{w_7 + 1, w_8}; \\
(C_n H_{2n})_{\alpha g} + S &= (C_n H_{2n})_{\alpha S}^-; \\
(C_n H_{2n+1} OH)_{\alpha S} + e &= (C_n H_{2n+1} OH)_{\alpha S}^-; \\
(C_n H_{2n-1} CHO)_{\alpha S} + e &= (C_{n-1} H_{2n-1} CHO)_{\alpha S}^-; \\
(C_n H_{2n})_{\alpha S} + e &= (C_n H_{2n})_{\alpha S}^-; \\
(C_n H_{2n+1} OH)_{\alpha S} &= (C_n H_{2n+1} O)_{\alpha S}^- + H_S^+; \\
(C_n H_{2n+1} O)_{\alpha S} &= (C_{n-1} H_{2n-1} CHO)_{\alpha S}^- + H_S^+; \\
(C_n H_{2n+1} OH)_{\alpha S} &= (C_n H_{2n+1})_{\alpha S}^+ + OH_S^-; \\
(C_n H_{2n+1})_{\alpha S} &= (C_n H_{2n})_{\alpha S}^- + H_S^+; \\
(C_n H_{2n+1})_{\alpha S} + h &= (C_n H_{2n+1})_{\alpha S}^+.
\end{aligned}$$

3.2. Реакції між компонентами межі фаз та компонентами регулярної структури

$$O_i + S = O_S + L;$$

$$M_i + S = M_S + L;$$

$$V_O + S = V_{OS} + L;$$

$$V_M + S = V_{MS} + L;$$

$$X_i + S = X_S + L;$$

$$Y_i + S = Y_S + L;$$

$$Z_i + S = Z_S + L.$$

3.3. Реакції в об'ємі регулярної структури

$$O_O + O_i = V_O;$$

$$M_M + M_i = V_M;$$

$$O_i + e = O_i^-;$$

$$O_i^- + e = O_i^{2-};$$

$$M_i + h = M_i^+;$$

$$M_i^+ + h = M_i^{++};$$

...

$$M_i^{(2k/g-1)+} + h = M_i^{(2k/g)+};$$

$$V_M + e = V_M^-;$$

$$V_O^+ + h = V_O^{++};$$

$$V_M + e = V_M^-;$$

$$V_M^- + e = V_M^{--};$$

$$V_M^{(2k/g-1)-} + e = V_M^{(2k/g)-};$$

...

$$X_{r0} = X_{ri} + V_O; r = \overline{v_0 + 1, v_1};$$

$$Y_{rM} = Y_{ri} + V_M; r = \overline{v_1 + 1, v_2};$$

$$X_{r0}^{(n_{r0}+1)-} + e = X_{r0}^{(n_{r0})-};$$

...

$$\begin{aligned}
& X_{r0}^{(j)-} + e = X_{r0}^{(j-1)-}; \\
& X_{r0}^{(j+1)-} + e = X_{r0}^{(j)-}; \\
& X_{r0}^{(j+2)-} + e = X_{r0}^{(j+1)-}; \\
& \dots \\
& X_{r0}^0 + e = X_{r0}^+; \\
& X_{r0}^0 + h = X_{r0}^+; \\
& \dots \\
& X_{r0}^{(j-2)+} + h = X_{r0}^{(j-1)+}; \\
& X_{r0}^{(j-1)+} + h = X_{r0}^{(j)+}; \\
& X_{r0}^{(j)+} + h = X_{r0}^{(j+1)+}; \\
& \dots \\
& X_{r0}^{(n_{r0}^+ - 1)+} + h = X_{r0}^{(n_{r0}^+)+}; \\
& Y_{rM}^{(n_{rM}^- + 1)-} + e = Y_{rM}^{(n_{rM}^-)-}; \\
& \dots \\
& Y_{rM}^{(j)-} + e = Y_{rM}^{(j-1)-}; \\
& Y_{rM}^{(j+1)-} + e = Y_{rM}^{(j)-}; \\
& Y_{rM}^{(j+2)-} + e = Y_{rM}^{(j+1)-}; \\
& \dots \\
& Y_{rM}^0 + e = Y_{rM}^-; \\
& Y_{rM}^0 + h = Y_{rM}^+; \\
& \dots \\
& Y_{rM}^{(j-2)+} + h = Y_{rM}^{(j-1)+}; \\
& Y_{rM}^{(j-1)+} + h = Y_{rM}^{(j)+}; \\
& Y_{rM}^{(j)+} + h = Y_{rM}^{(j+1)+}; \\
& \dots \\
& Y_{rM}^{(n_{rM}^+ - 1)+} + h = Y_{rM}^{(n_{rM}^+)+}; \\
& Z_{ri}^{(n_{ri}^- + 1)-} + e = \overline{Z_{ri}^{(n_{ri}^-)-}}; \quad r = v_2 + 1, v_3; \\
& \dots \\
& Z_{ri}^{(j)-} + e = Z_{ri}^{(j-1)-};
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& Z_{ri}^{(j+1)-} + e = Z_{ri}^{(j)-}; \\
& Z_{ri}^{(j+2)-} + e = Z_{ri}^{(j+1)-}; \\
& \dots \\
& Z_{ri}^0 + e = Z_{ri}^-; \\
& Z_{ri}^0 + h = Z_{ri}^+; \\
& \dots \\
& Z_{ri}^{(j-2)+} + h = Z_{ri}^{(j-1)+}; \\
& Z_{ri}^{(j-1)+} + h = Z_{ri}^{(j)+}; \\
& Z_{ri}^{(j)+} + h = Z_{ri}^{(j+1)+}; \\
& \dots \\
& Z_{ri}^{(n_i^+ - 1)+} + h = Z_{ri}^{(n_i^+)+}.
\end{aligned}$$

РОЗДІЛ 4. ФУНДАМЕНТАЛЬНА СИСТЕМА РІВНЯНЬ МАСОПЕРЕНОСУ ТА ПЕРЕНОСУ ЗАРЯДУ В НАПІВПРОВІДНИКОВОМУ МАТЕРІАЛІ

4.1. Апроксимація макроструктури матеріалу ЧЕ із врахуванням просторового розподілу області межі зерен

Не зупиняючись на деталях обґрунтування, наведемо результуючі співвідношення окремо для кожної з однорідних областей гетерогенної системи. Маємо: а) для області регулярного напівпровідника:

$$\begin{aligned}
& \nabla(\chi \nabla \psi) = -\rho; \\
& \frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \nabla j_n - R_n; \\
& \frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla j_p - R_p; \\
& \frac{\partial c_{rj}}{\partial t} = \nabla J_{rj}^A + \dot{e}_{rj}, \quad j = \overline{-1, n_r^-}; \\
& \frac{\partial c_{r0}}{\partial t} = \nabla J_{r0} + \dot{e}_{r0} + \dot{r}_{r0}^v, \quad j = 0; \\
& \frac{\partial c_{rj}}{\partial t} = -\nabla J_{rj}^D + \dot{e}_{rj}, \quad j = \overline{1, n_r^+};
\end{aligned} \tag{4.1}$$

де

$$\rho = q[p - n + \sum_{r=1}^v \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} (j c_{rj})]; \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned} j_n &= -q\mu_n n \nabla \varphi_n = qD_n \nabla n + qn\mu_n E_n = \mu_n n \nabla E_{F_n}; \\ j_p &= -q\mu_p n \nabla \varphi_p = -qD_p \nabla p + qp\mu_p E_p = \mu_p p \nabla E_{F_p}; \end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} J_{rj}^A &= -D_{rj}^A \nabla c_{rj} - \mu_{rj}^A c_{rj} E = \\ &= -D_{rj}^A \nabla c_{rj} + D_{rj}^A c_{rj} \nabla \frac{\Psi}{\varphi_T} = -D_{rj}^A \left(\nabla c_{rj} + c_{rj} \nabla \frac{\Psi}{\varphi_T} \right), \quad j = \overline{-1, n_r^-}; \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} J_{rj}^D &= -D_{rj}^D \nabla c_{rj} + \mu_{rj}^D c_{rj} E = \\ &= -D_{rj}^D \nabla c_{rj} - D_{rj}^D c_{rj} \nabla \frac{\Psi}{\varphi_T} = -D_{rj}^D \left(\nabla c_{rj} + c_{rj} \nabla \frac{\Psi}{\varphi_T} \right), \quad j = \overline{1, n_r^+}; \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$J_{r0} = -D_{r0} \nabla c_{r0}, \quad j = 0;$$

$$R_n = \sum_{r=1}^v \sum_{j=-1}^{n_r^-} (k_{rj}^e c_{rj+1} - g_{rj}^e c_{rj}); \quad R_p = \sum_{r=1}^v \sum_{j=1}^{n_r^+} (k_{rj}^h c_{rj+1} - g_{rj}^h c_{rj}); \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned} \dot{e}_{rj} &= k_{rj}^e c_{rj+1} - (k_{rj-1}^e + g_{rj}^e) c_{rj} + g_{rj-1}^e c_{rj-1}, \quad j = \overline{-1, n_r^-}; \\ \dot{e}_{rj} &= g_{r-1}^e c_{r-1} - (k_{r-1}^e + k_{r1}^h) c_{r0} + g_{r1}^h c_{r1}, \quad j = 0; \\ \dot{e}_{rj} &= k_{rj}^h c_{rj-1} - (k_{rj+1}^h + g_{rj}^h) c_{rj} + g_{rj+1}^h c_{rj+1}, \quad j = \overline{1, n_r^+}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

причому:

$$\begin{aligned} j_{common} &= j_n + j_p + j_{ion}; \\ j_{ion} &= q \sum_{r=1}^v \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} (j J_{rj}); \end{aligned} \quad (4.8)$$

б) для областей межі ТТ-ТТ та для області основи:

$$\begin{aligned} \dot{N}_\alpha &= \nabla(D_\alpha \nabla N_\alpha); \\ \nabla(\chi \nabla \Psi) &= -\rho_{DE}, \end{aligned} \quad (4.9)$$

де

$$D_\alpha = \begin{cases} D_\alpha^{I3}, & y \leq h + \delta \\ D_\alpha^{KO}, & y > h + \delta \end{cases}, \quad \chi = \begin{cases} \chi^{I3}, & y \leq h + \delta \\ \chi^{KO}, & y > h + \delta \end{cases}; \quad (4.10)$$

в) для межі поділу металоокислу з газовим середовищем, з іншим металоокислом та з основою:

$$\begin{aligned}
\dot{N}_{\alpha j}^{(i)} &= \dot{r}_{\alpha j}^{(i)} + \dot{e}_{\alpha j}^{(i)}, \quad j = \overline{-1, n_{\alpha}^-}; \\
\dot{N}_{\alpha 0}^{(i)} &= \dot{s}_{\alpha}^{(i)} + \dot{v}_{r\alpha}^{(i)} + \dot{r}_{\alpha 0}^{(i)} + \dot{e}_{\alpha 0}^{(i)}, \quad j = 0; \\
\dot{N}_{\alpha j}^{(i)} &= \dot{r}_{\alpha j}^{(i)} + \dot{e}_{\alpha j}^{(i)}, \quad j = \overline{1, n_{\alpha}^+}, \quad \alpha = \overline{1, w},
\end{aligned} \tag{4.11}$$

причому значення $i \in \{1, 2, 3, 1', 2', 3'\}$ відповідають площинам поділу напівпровідникового шару з газовим середовищем, областю зерен та областю межі з керамічною основою. Номери без штриха відповідають лівій, а номери зі штрихом — правій області напівпровідника. Складові $\dot{s}, \dot{v}, \dot{e}$ визначаються наступними співвідношеннями:

$$\dot{s}_{\alpha}^{(i)} = k_{\alpha}^a \left(N^* - \sum_{\alpha=1}^w \sum_{j=\overline{n_{\alpha}^-}}^{n_{\alpha}^+} N_{\alpha j} \right) p_{\alpha} - k_{\alpha}^d N_{\alpha 0}, \quad i \in \{1, 1'\}; \tag{4.12}$$

$$\begin{aligned}
\dot{s}_{\alpha}^{(i)} &= k_{\alpha}^{+(i)} N_{\alpha 0}^{m(i)} - k_{\alpha}^{-(i)} N_{\alpha 0}^{(i)}, \quad i \notin \{1, 1'\}; \\
\dot{v}_{r\alpha}^{(i)} &= k_{r\alpha}^{+(i)} c_{\alpha 0}^{(i)} - k_{r\alpha}^{-(i)} N_{\alpha 0}^{(i)}, \quad \alpha = \overline{1, w};
\end{aligned} \tag{4.13}$$

$$\begin{aligned}
\dot{e}_{\alpha j} &= k_{\alpha j}^e c_{\alpha j+1} - (k_{\alpha j-1}^e + g_{\alpha j}^e) c_{\alpha j} + g_{\alpha j-1}^e c_{\alpha j-1}, \quad j = \overline{-1, n_{\alpha}^-}; \\
\dot{e}_{\alpha 0} &= g_{\alpha-1}^e c_{\alpha-1} - (k_{\alpha-1}^e + k_{\alpha 1}^h) c_{\alpha 0} + g_{\alpha 1}^h c_{\alpha 1}, \quad j = 0; \\
\dot{e}_{\alpha j} &= k_{\alpha j}^e c_{\alpha j-1} - (k_{\alpha j+1}^e + g_{\alpha j}^e) c_{\alpha j} + g_{\alpha j+1}^e c_{\alpha j+1}, \quad j = \overline{1, n_{\alpha}^+};
\end{aligned} \tag{4.14}$$

г) для межі поділу основи з газовим середовищем:

$$\dot{N}_{\alpha}^{(0)} = s_{\alpha}^{(0)} + v_{\alpha\alpha}^{(0)}, \tag{4.15}$$

де

$$\dot{v}_{\alpha\alpha}^{(i)} = k_{\alpha}^{+(i)} N_{\alpha 0}^{(i)} - k_{\alpha}^{-(i)} N_{\alpha 0}^{(i)}, \quad \alpha = \overline{1, w}; \tag{4.16}$$

д) для багатокомпонентного газового середовища вигляд рівнянь залежить від режиму протікання газу. При числах Кнудсена $Kn < 0,001$ використовують рівняння газової динаміки Ейлера і Нав'є — Стокса [32], а при більших числах Кнудсена ($Kn > 2,0$) можна застосувати метод прямого моделювання розрідженого газу — метод Монте-Карло [33].

4.2. Апроксимація макроструктури матеріалу ЧЕ без врахування просторового розподілу області межі зерен

Запишемо лише рівняння, які змінили свій вигляд. Маємо:

б) для області основи:

$$\begin{aligned}
\dot{N}_{\alpha} &= \nabla(D_{\alpha} \nabla N_{\alpha}); \\
\nabla(\chi \nabla \psi) &= -\rho_{DE},
\end{aligned} \tag{4.17}$$

де $D_\alpha = D_\alpha^{KO}$, $y > h + \delta$; $\chi = \chi^{KO}$, $y > h + \delta$; (4.18)

в) для межі поділу регулярного елементу структури напівпровідника з газовим середовищем, іншим регулярним фрагментом та з основою:

$$\begin{aligned} \dot{N}_{\alpha j}^{(i)} &= \nabla J_{\alpha j}^{A(i)} + \dot{r}_{\alpha j}^{(i)} + \dot{e}_{\alpha j}^{(i)}, j = \overline{-1, n_\alpha^-}; \\ \dot{N}_{\alpha j}^{(i)} &= -\nabla J_{\alpha j}^{D(i)} + \dot{r}_{\alpha j}^{(i)} + \dot{e}_{\alpha j}^{(i)}, j = \overline{1, n_\alpha^+}, \alpha = \overline{1, w}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

при $j \neq 0$ та значеннях індексу $i \in \{1, 2, 3, 1', 3'\}$, а також

$$\begin{aligned} \dot{N}_{\alpha 0}^{(i)} &= \nabla J_{\alpha 0}^{(i)} + \dot{s}_\alpha^{(i)} + \dot{v}_{r\alpha}^{(i)} + \dot{r}_{\alpha 0}^{(i)} + \dot{e}_{\alpha 0}^{(i)}, i \in \{1, 1'\}; \\ \dot{N}_{\alpha 0}^{(2)} &= \nabla J_{\alpha 0}^{(2)} + \dot{v}_{r\alpha}^{-(2)} + \dot{v}_{r\alpha}^{+(2)} + \dot{r}_{\alpha 0}^{(2)} + \dot{e}_{\alpha 0}^{(2)}, i = 2; \\ \dot{N}_{\alpha 0}^{(i)} &= \nabla J_{\alpha 0}^{(i)} + \dot{v}_{r\alpha}^{(i)} + \dot{v}_{\alpha\alpha}^{(i)} + \dot{r}_{\alpha 0}^{(i)} + \dot{e}_{\alpha 0}^{(i)}, i \in \{3, 3'\}; \alpha = \overline{1, w}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

при $j = 0$. Тут

$$\begin{aligned} J_{\alpha j}^{(i)} &= -D_{\alpha j}^{(i)} \frac{\partial N_{\alpha j}^{(i)}}{\partial x} \mp \mu_{\alpha j}^{(i)} N_{\alpha j}^{(i)} E; \\ D_{\alpha j}^{(i)} &= D_{\alpha j}^{S(i)}, i \in \{1, 1'\}; D_{\alpha j}^{(2)} = D_{\alpha j}^{\Gamma 3(2)}, i = 2; D_{\alpha j}^{(i)} = D_{\alpha j}^{\Gamma 3(i)}, i \in \{3, 3'\}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

де верхній знак відповідає від'ємно, а нижній — додатньо зарядженим іонам. Для нейтральних часток друга складова у співвідношенні 4.21.а дорівнює нулю. Інші залежності для цього типу структури матеріалу визначаються так само, як і в попередньому випадку.

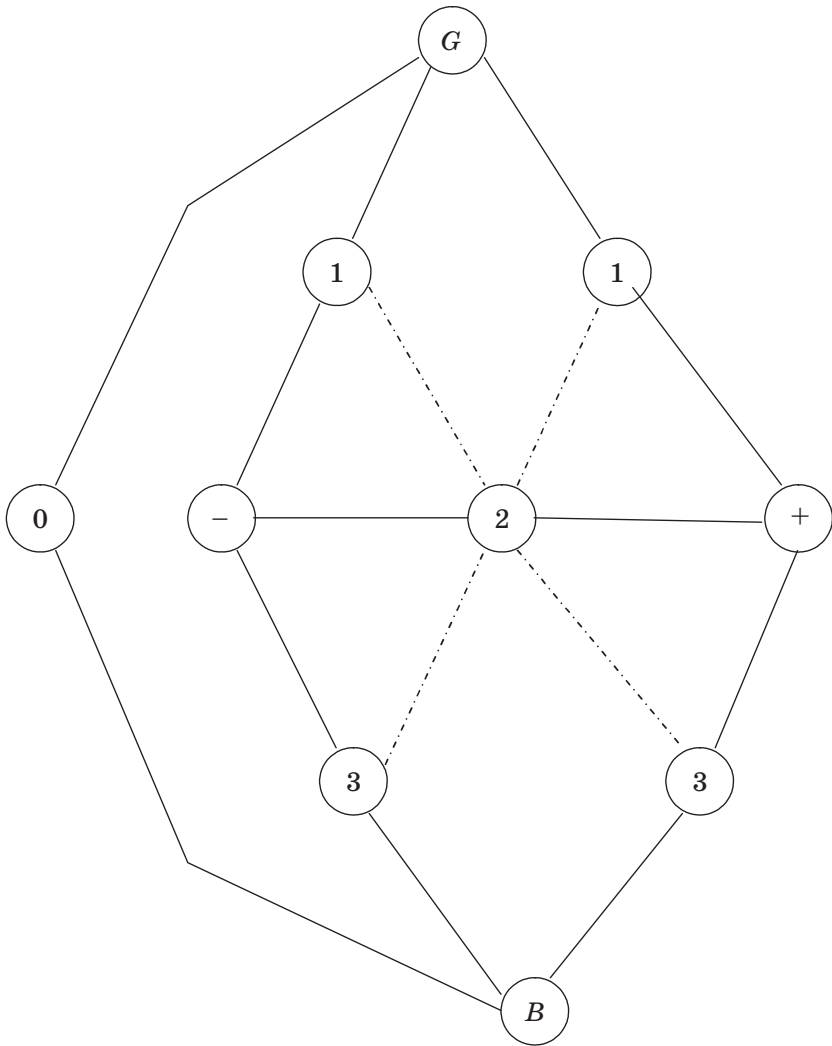
Вирази для \dot{r} у загальному випадку досить громіздкі і тут не наведені. Без зайвих труднощів вони знаходяться з рівнянь матеріального балансу по аналогії з тим, як це виконано, наприклад, у [24].

4.3. Краєві та початкові умови

Запишемо краєві та початкові умови для другого варіанта апроксимації матеріалу чутливого елементу.

Для точок розгалуження поверхневої реакції граничні умови мають вигляд:

$$\begin{aligned} x = 0, y = b; \\ J_y(N_\alpha)^- + J_y(N_\alpha)^+ = J_x(N_\alpha)^-; \\ x = h, y = b; \\ J_y(N_\alpha)^- + J_y(N_\alpha)^+ = J_x(N_\alpha)^+; \end{aligned}$$



———— гомоперехід
 - - - - - гетероперехід

Рис. 1.3. Граф взаємозв'язків між компонентами моделі макроструктури полікристала (варіант № 2)

Для області регулярної структури граничні умови мають вигляд:

$$x = 0_{+0}, y \in (0_{+0}, b_{-0}) \cup (b_{+0}, l);$$

$$\chi \frac{\partial \Psi}{\partial x} = -Q_{S1};$$

$$\eta_x j_n = -qR_{S1}^n; \eta_x j_p = -qR_{S1}^p;$$

$$\eta_x J_{r0} = -\dot{v}_{r\alpha}; \eta_x J_{rj} = 0, j \neq 0; r = \overline{1, v};$$

$$x \in (0_{+0}, h_{-0}), y = b;$$

$$-\chi \frac{\partial \Psi^{(-)}}{\partial y} + \chi \frac{\partial \Psi^{(+)}}{\partial y} = -Q_{S2};$$

$$\eta_y j_n = \eta_y j_n^b - qR_{S2}^n; \eta_y j_p = \eta_y j_p^b - qR_{S2}^p;$$

$$\eta_y J_{r0} = -\dot{v}_{r\alpha}; \eta_y J_{rj} = 0, j \neq 0; r = \overline{1, v};$$

$$x \in (0_{+0}, h_{-0}); y = 0_{+0};$$

$$\Psi = \Psi_B; \varphi_n = \varphi_p = 0; \eta_y J_{ri} = 0, j = \overline{n_r^-, n_r^+}, r = \overline{1, v};$$

$$x \in (0_{+0}, h_{-0}); y = l_{-0};$$

$$\Psi = \Psi_B; \varphi_n = \varphi_p = 0; \eta_y J_{rj} = 0, j = \overline{n_r^-, n_r^+}, r = \overline{1, v};$$

де Ψ_B визначається із системи рівнянь:

$$n(\Psi_B) \cdot p(\Psi_B) = n_i^2;$$

$$\rho(\Psi_B) = 0.$$

У вищенаведених співвідношеннях поверхневий заряд та швидкості поверхневої рекомбінації визначаються залежностями:

$$Q = q \sum_{\alpha=1}^w \sum_{j=n_{\alpha}^-}^{n_{\alpha}^+} j N_{\alpha j};$$

$$R_n^S = \sum_{\alpha=1}^w \sum_{j=n_{\alpha}^-}^{-1} (k_{\alpha j}^e N_{\alpha j+1} - g_{\alpha j}^e N_{\alpha j});$$

$$R_p^S = \sum_{\alpha=1}^w \sum_{j=1}^{n_{\alpha}^+} (k_{\alpha j}^h N_{\alpha j-1} - g_{\alpha j}^h N_{\alpha j}).$$

Початкові умови мають вигляд:

$$n(0) = n^0; p(0) = p^0;$$

$$c_{rj}(0) = c_{rj}^0, r = \overline{1, v}; j = \overline{n_r^-, n_r^+};$$

$$N_{\alpha j}(0) = N_{\alpha j}^0, \alpha = \overline{1, w}; j = \overline{n_{\alpha}^-, n_{\alpha}^+}.$$

Глава II

СТАТИКА: СТАТИСТИКА ЕЛЕКТРОНІВ ТА ДІРОК У МЕТАЛООКИСНОМУ НАПІВПРОВІДНИКУ

РОЗДІЛ 1. ТОТОЖНОСТІ ЗОННИХ ДІАГРАМ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СТРУКТУР

1.1. Аналіз систем позначень різних авторів

Розглянемо системи позначень на зонних діаграмах напівпровідникових структур, характерні для робіт Г. П. Пеки [1], С. Г. Мулярчика [2], Ф. Ф. Волькенштейна [3] та спробуємо привести їх до спільного, так би мовити, знаменника (див. рис. 2.1).

Згідно з [1], електростатичний потенціал, що відповідає середині забороненої зони напівпровідника, позначають через ψ . Усі величини, що відносяться до об'ємної, масивної фази, позначають індексом 0, а до поверхні — індексом S. Тобто,

$$\begin{aligned}\psi|_{x \rightarrow \infty} &= \psi_0; \\ \psi|_{x=0} &= \psi_S.\end{aligned}$$

Позначимо:

$$\begin{aligned}\phi &= \psi - \psi_0; \\ V &= \psi_0 - \psi,\end{aligned}\tag{1}$$

так що вигин енергетичних зон буде характеризуватись [4] співвідношеннями:

$$\begin{aligned}E_C(r) &= E_{C0} - e\phi(r) = E_{C0} + qV(r); \\ E_V(r) &= E_{V0} - e\phi(r) = E_{V0} + qV(r).\end{aligned}$$

Як показано в роботі [2], у загальному випадку в нерівноважних умовах параметр η інтегралу $\Phi_{1/2}(\eta)$ Фермі — Дірака порядку 1/2 визначається як

$$\begin{aligned}\eta_C &= \frac{F_n - E_C}{kT}; \\ \eta_V &= \frac{E_V - F_p}{kT},\end{aligned}$$

де F_n, F_p — енергії квазірівнів Фермі для електронів та дірок.

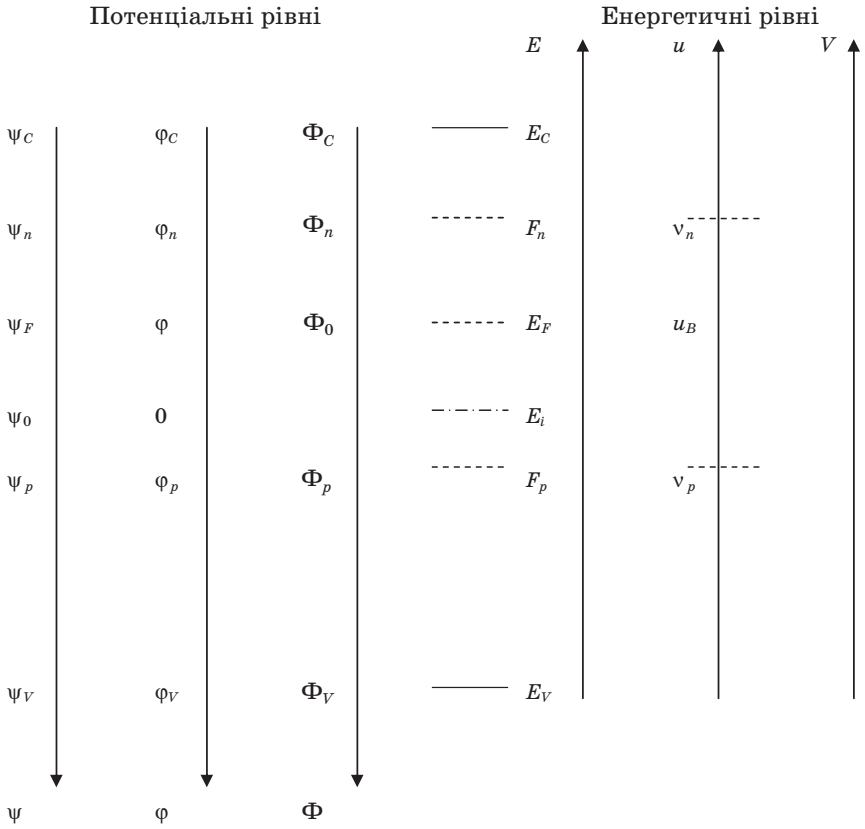


Рис. 2.1. Відповідність енергетичних і потенціальних рівнів відповідно до систем позначень різних авторів (1, 2, 3, 4).

ЗП — зона провідності, ВЗ — валентна зона

А тоді, враховуючи співвідношення (2),

$$\eta_C = \frac{F_n - E_C}{kT} = \frac{F_n - E_{C0} + e\varphi(r)}{kT} = \frac{F_n - E_{C0} - qV(r)}{kT};$$

$$\eta_V = \frac{E_V - F_p}{kT} = \frac{E_{V0} - e\varphi(r) - F_p}{kT} = \frac{E_{V0} + qV(r) - F_p}{kT}$$

або у традиційній для спеціальної літератури формі:

$$\eta_C = \frac{F_n - E_C + e\varphi}{kT} = \frac{F_n - E_C - qV}{kT};$$

$$\eta_V = \frac{E_V - F_p - e\varphi}{kT} = \frac{E_{V0} - F_p + qV}{kT}. \quad (2)$$

Позначимо:

$$\begin{aligned}
 u_B &= \frac{E_F - E_i}{u_T}; \quad u_N = \frac{F_n - E_F}{u_T}; \quad u_P = \frac{F_p - E_F}{u_T}; \\
 u_n &= \frac{F_n - E_i}{u_T}; \quad u_p = \frac{F_p - E_i}{u_T}; \\
 u = \beta V &= \frac{\Psi_0 - \Psi}{\Phi_T}; \quad Y = \beta\varphi = \frac{\Psi - \Psi_0}{\Phi_T}; \quad \beta = \frac{q}{kT} = u_T^{-1}q; \\
 \Phi_T &= \frac{kT}{q} = q^{-1}u_T; \quad u_T = kT,
 \end{aligned} \tag{3}$$

де Y — безрозмірний вигин зон у даній точці;

V — обернений електростатичний потенціал;

u — безрозмірний обернений електростатичний потенціал.

А тоді:

$$\begin{aligned}
 \eta_C &= \frac{1}{kT} (F_n - E_F + E_F - E_i + E_i - E_C - qV) = \\
 &= \frac{1}{kT} (F_n - E_F + E_F - E_i + E_i - E_C - qV) = \\
 &= u_T^{-1} [(F_n - E_F) + (E_F - E_i) - (E_C - E_i) - qV]; \\
 \eta_V &= \frac{1}{kT} (E_V - E_i + E_i - F_p + E_F - E_F + qV) = \\
 &= u_T^{-1} [-(F_p - E_F) - (E_F - E_i) + (E_V - E_i) + qV],
 \end{aligned}$$

так що:

$$\begin{aligned}
 \eta_C &= u_N + u_B - u - 0,5u_T^{-1}E_G = u_N + u_B + Y - 0,5u_T^{-1}E_G = \\
 &= u_n - u - 0,5u_T^{-1}E_G;
 \end{aligned} \tag{4}$$

$$\begin{aligned}
 \eta_V &= -u_p - u_B + u + 0,5u_T^{-1}E_G = -u_p - u_B - Y + 0,5u_T^{-1}E_G = \\
 &= -u_p + u + 0,5u_T^{-1}E_G.
 \end{aligned}$$

Перейдемо у виразах (4) від енергій до потенціалів (див. рис. 2.1):

$$\begin{aligned}
 \eta_C &= \beta(-\psi_n + \psi_C + \varphi) = \Phi_T^{-1}(-\psi_n + \psi_C - V); \\
 \eta_V &= \beta(-\psi_V + \psi_p + \varphi) = \Phi_T^{-1}(-\psi_V + \psi_p + V)
 \end{aligned}$$

або ж:

$$\eta_c = \beta \left(-\varphi_n + \varphi - \frac{\Phi_G}{2} \right) = \Phi_T^{-1} \left(-\varphi_n - V - \frac{\Phi_G}{2} \right);$$

$$\eta_V = \beta \left(\varphi_p - \varphi - \frac{\varphi_G}{2} \right) = \varphi_T^{-1} \left(\varphi_p + V - \frac{\varphi_G}{2} \right).$$

Відповідно до системи позначень Г. П. Пеки [1]:

$$\lambda = \exp\{\beta(\Phi_0 - \Psi_0)\} = \exp\{u_T^{-1}(E_i - E_F)\};$$

$$P = \beta(\Phi_p - \Phi_0);$$

$$N = \beta(\Phi_n - \Phi_0).$$

Очевидно (див. рис. 2.1):

$$\ln(\lambda) = \beta\varphi_F = \beta(\Psi_F - \Psi_0);$$

$$\Psi_p - \Psi_F = \Phi_p - \Phi_0;$$

$$\Psi_n - \Psi_F = \Phi_n - \Phi_0;$$

$$\varphi_F = \Psi_F - \Psi_0.$$

А тоді:

$$\eta_c = \left(-N - \ln(\lambda) + Y + \frac{\varphi_G}{2\varphi_T} \right);$$

$$\eta_V = \left(P + \ln(\lambda) - Y - \frac{\varphi_G}{2\varphi_T} \right).$$

1.2. Тотожності зонних діаграм напівпровідникових структур

Підсумовуючи сказане, ми можемо записати наступні (див. рис. 2.1) співвідношення:

$$\lambda = \exp\{\beta(\Phi_0 - \Psi_0)\} = \exp\{u_T^{-1}(E_i - E_F)\} = e^{-u_B};$$

$$u_B = \frac{E_F - E_i}{u_T} = -u_T^{-1}(E_i - E_F) = -\beta(\Phi_0 - \Psi_0) = -\ln(\lambda) = \ln(\lambda^{-1});$$

$$P = \beta(\Phi_p - \Phi_0) = -\frac{F_p - E_F}{u_T} = -u_P;$$

$$\varphi_p = \Phi_p - \Phi_0 = \beta^{-1}P = -\varphi_T u_P;$$

$$u_P = \frac{F_p - E_F}{u_T} = -\beta(\Phi_p - \Phi_0) = -P;$$

$$\varphi_p = \Phi_p - \Psi_0 = -\frac{F_p - E_i}{q} = -\frac{1}{q}(F_p - E_F + E_F - E_i) = -\varphi_T(u_P + u_B) =$$

$$\begin{aligned}
&= -\varphi_T u_p = -\varphi_T v_p; \\
u_p = v_p = u_p + u_B = u_T^{-1}(F_p - E_F + E_F - E_i) = u_T^{-1}(F_p - E_i) = \\
&= -\beta(\Phi_p - \Psi_0) = -\beta\varphi_p; \\
N = \beta(\Phi_n - \Phi_0) = -\frac{F_n - E_F}{u_T} = -u_N; \\
\varphi_N = \Phi_n - \Phi_0 = \beta^{-1}N = -\varphi_T u_N; \\
u_N = \frac{F_n - E_F}{u_T} = -\beta(\Phi_n - \Phi_0) = -N; \\
\varphi_n = \Phi_n - \Psi_0 = -\frac{F_n - E_i}{q} = -\frac{1}{q}(F_n - E_F + E_F - E_i) = -\varphi_T(u_N + u_B) = \\
&= -\varphi_T u_n = -\varphi_T v_n; \\
u_n = v_n = u_N + u_B = u_T^{-1}(F_n - E_F + E_F - E_i) = u_T^{-1}(F_n - E_i) = \\
&= -\beta(\Phi_n - \Psi_0) = -\beta\varphi_p; \\
\varphi = \Psi - \Psi_0 = -(\Psi_0 - \Psi) = -V; \\
V = \Psi_0 - \Psi = -(\Psi - \Psi_0) = \varphi; \\
\varphi = \Psi - \Psi_0 = \beta^{-1}Y = -\varphi_T u; \\
V = \Psi_0 - \Psi = \varphi_T u = -\beta^{-1}Y; \\
u = \frac{\Psi_0 - \Psi}{\varphi_T} = -\varphi_T^{-1}\varphi = \beta V; \\
Y = \frac{\Psi - \Psi_0}{\varphi_T} = \beta\varphi = -\varphi_T^{-1}V; \\
\beta = \frac{q}{kT} = u_T^{-1}q; \\
\varphi_T = \frac{kT}{q} = q^{-1}u_T; \\
u_T = kT.
\end{aligned}$$

1.3. Приклад застосування результату

Як приклад практичного застосування викладеного, запишемо в термінах вищеописаних змінних рівняння Пуассона

$$\varepsilon_0 \nabla(\varepsilon \nabla \psi) = -\varphi_T^{-1} \rho(\psi) = -\beta \rho(\psi);$$

умови на границях твердих фаз:

$$\eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^+ - \eta \varepsilon_1 \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^- = -\sigma_S(\psi_S) = -\sigma_S(\psi_S),$$

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^+ = \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^-; \quad \psi^+ = \psi^-$$

та умови на границі з газовим середовищем:

$$\eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^+ = -\sigma_S(\psi_S) = -\sigma_S(\psi_S),$$

де η — зовнішній одиничний вектор, ортогональний до поверхні поділу фаз.

А тоді маємо:

$$\varepsilon_0 \nabla(\varepsilon \nabla \varphi) = -\varphi_T^{-1} \rho(\varphi) = -\beta \rho(\varphi);$$

$$\eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^+ - \eta \varepsilon_1 \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial y} \right)^- = -\sigma_S(\varphi_S) = -\sigma_S(\varphi_S);$$

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^+ = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^-; \quad \varphi^+ = \varphi^-;$$

$$\eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)^+ = -\sigma_S(\varphi_S) = -\sigma_S(\varphi_S)$$

для електростатичного потенціалу в традиційній системі відліку;

$$\varepsilon_0 \nabla(\varepsilon \nabla V) = \varphi_T^{-1} \rho(V) = \beta \rho(V);$$

$$-\eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)^+ + \eta \varepsilon_1 \varepsilon_0 \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)^- = -\sigma_S(V_S) = -\sigma_S(V_S);$$

$$\left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)^+ = \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)^-; \quad V^+ = V^-;$$

$$-\eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)^+ = -\sigma_S(V_S) = -\sigma_S(V_S)$$

для оберненого електростатичного потенціалу;

$$\begin{aligned}\varepsilon_0 \nabla(\varepsilon \nabla Y) &= -\varphi_T^{-1} \rho(Y) = -\beta \rho(Y); \\ \eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial Y}{\partial y} \right)^+ - \eta \varepsilon_1 \varepsilon_0 \left(\frac{\partial Y}{\partial y} \right)^- &= -\varphi_T^{-1} \sigma_S(Y_S) = -\beta \sigma_S \sigma_S(Y_S); \\ \left(\frac{\partial Y}{\partial x} \right)^+ &= \left(\frac{\partial Y}{\partial x} \right)^-; \quad Y^+ = Y^-, \\ \eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial Y}{\partial x} \right)^+ &= -\varphi_T^{-1} \sigma_S \sigma_S(Y_S) = -\beta \sigma_S \sigma_S(Y_S)\end{aligned}$$

для безрозмірного електростатичного потенціалу;

$$\begin{aligned}\varepsilon_0 \nabla(\varepsilon \nabla u) &= \varphi_T^{-1} \rho(u) = \beta \rho(u); \\ -\eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^+ + \eta \varepsilon_1 \varepsilon_0 \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^- &= -\varphi_T^{-1} \sigma_S(u_S) = -\beta \sigma_S(u_S); \\ \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^+ &= \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^-; \quad u^+ = u^-, \\ -\eta \varepsilon \varepsilon_0 \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^+ &= -\varphi_T^{-1} \sigma_S(u_S) = -\beta \sigma_S(u_S)\end{aligned}$$

для безрозмірного оберненого електростатичного потенціалу.

РОЗДІЛ 2. КОЕФІЦІЄНТИ ІНЖЕКЦІЇ ТА ЕКСТРАКЦІЇ НОСІЇВ ЗАРЯДУ ОБ'ЄМНИМИ ДОМІШКОВИМИ ЦЕНТРАМИ

Визначимо у межах зонної моделі напівпровідника константи об'ємних квазіхімічних реакцій домішкових центрів із рухливими носіями заряду, які фігурують у математичних моделях попередньої глави.

2.1. Ймовірність екстракції

За аналогією з [5, 6], ймовірність екстракції j -го електрону із зони провідності напівпровідника на j -рівень дискретного домішкового центру r -сорту, дорівнює:

$$k_{rj}^e = c_{rj}^e \cdot n,$$

а j -ої дірки з валентної зони:

$$k_{rj}^h = c_{rj}^h \cdot p,$$

де n, p — концентрації електронів та дірок у даній точці об'єму напівпровідника;

k_{rj}^e, k_{rj}^h — коефіцієнти екстракції j -го електрону із зони провідності (j -ої дірки з валентної зони) напівпровідника на j -рівень дискретного домішкового центру r -сорту, дорівнюють:

$$c_{rj}^e = \sigma_{rj}^e \cdot v_e;$$

$$c_{rj}^h = \sigma_{rj}^h \cdot v_h,$$

$\sigma_{rj}^e, \sigma_{rj}^h$ — ефективні перерізи екстракції (захоплення) носіїв заряду:

$$\sigma_{rj}(T) = \sigma_{rj}^0 \cdot \exp\left(-\frac{\Delta E_{rj}^\sigma}{kT}\right), \quad (1)$$

ΔE_{rj}^σ — температурний енергетичний бар'єр,

v_e, v_h — середні теплові швидкості носіїв заряду:

$$v_{e(h)} = \sqrt{\frac{3kT}{m_{e(h)}^*}}$$

або:

$$v_{e(h)} = v_{e(h)}^0 \sqrt{T}, \quad (2)$$

де

$$v_{e(h)}^0 = \sqrt{\frac{3k}{m_{e(h)}^*}}. \quad (3)$$

Згідно з [9], для достатньо загального випадку еліпсоїдальних ізоенергетичних поверхонь, концентрація електронів та дірок у напівпровіднику дається залежностями:

$$n = N_C \cdot \alpha(\eta_C);$$

$$p = N_V \cdot \alpha(\eta_V),$$

де N_C, N_V — ефективні числа станів у зоні провідності та у валентній зоні, відповідно, причому:

$$N_{C(V)} = 2,51 \cdot 10^{25} \cdot \left(\frac{m_{n(p)}}{m_0}\right)^{3/2} \left(\frac{T}{300}\right)^{3/2}, \quad m^{-3}, \quad (4)$$

де m_0 — маса електрону у вакуумі;

$m_{n(p)}$ — ефективна маса носія заряду (електрону чи дірки);

$$\alpha(\eta) = 2\sqrt{\pi} \cdot \Phi_{1/2}(\eta),$$

де $\Phi_{1/2}(\eta)$ — інтеграл Фермі — Дірака, який легко обчислюється при застосуванні кусково-лінійної екстраполяції, так що

$$\alpha(\eta) = \begin{cases} e^\eta, & -\infty < \eta < -1; \\ \frac{1}{\frac{1}{4} + e^{-\eta}}, & -1 \leq \eta < 5; \\ \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \eta^{3/2}, & 5 \leq \eta < \infty \end{cases} \quad (5)$$

для випадку невідродженого, перехідного та виродженого напівпровідника, відповідно. Тут

$$\eta_c = (F_n - E_c)u_T^{-1}, \quad \eta_v = (E_v - F_p)u_T^{-1}, \quad (6)$$

де F_n, F_p — енергії квазірівнів Фермі для електронів та дірок.

Ми, таким чином, маємо можливість розрахувати коефіцієнти k_{rj}^e, k_{rj}^h з використанням апроксимації (36) для довільного режиму переносу електронно-діркового газу в об'ємі напівпровідника.

У даному розгляді обмежимося невідродженим випадком. Концентрації електронів та дірок у даній точці об'єму напівпровідника визначаються тут співвідношеннями:

$$\begin{aligned} n &= \delta n_i \exp(u_N + u_B - u); \\ p &= \delta^{-1} n_i \exp(-u_P - u_B + u) \end{aligned} \quad (7)$$

або:

$$\begin{aligned} n &= \delta n_i \exp(-\varphi_N - \varphi_B + Y) = \delta n_i \exp(-\varphi_n + \varphi); \\ p &= \delta^{-1} n_i \exp(\varphi_P + \varphi_B - Y) = \delta^{-1} n_i \exp(\varphi_p - \varphi), \end{aligned} \quad (8)$$

де

$$\delta = (N_c / N_v)^{1/2} M_c^{1/4} = (m_n / m_p)^{3/4} M_c^{1/4};$$

$$n_i = (N_c N_v)^{1/2} \exp(-E_g / (2u_T));$$

$$u_N = (F_n - E_F)u_T^{-1};$$

$$u_P = (F_p - E_F)u_T^{-1};$$

$$u_B = (E_F - E_i)u_T^{-1};$$

$$u = (\psi_0 - \psi) \varphi_T^{-1};$$

$$\varphi_N = (\psi_n - \psi_F) \varphi_T^{-1};$$

$$\varphi_P = (\psi_p - \psi_F) \varphi_T^{-1};$$

$$\begin{aligned}
Y &= (\Psi - \Psi_0)\varphi_T^{-1}; \\
\varphi_B &= (\Psi_F - \Psi_0)\varphi_T^{-1}; \\
u_T &= kT; \\
\varphi_T &= kT/q = u_T q^{-1}.
\end{aligned}$$

А тоді ймовірність екстракції j -го електрону із зони провідності напівпровідника на j -рівень дискретного домішкового центру r -сорту дорівнює:

$$\begin{aligned}
k_{rj}^e &= c_{rj}^e \cdot n = \delta c_{rj}^e n_i \exp(u_N + u_B - u) = \\
&= \delta c_{rj}^e n_i \exp(-\varphi_N - \varphi_B + Y) = \delta c_{rj}^e n_i \exp(-\varphi_n + \varphi),
\end{aligned} \tag{9}$$

а ймовірність екстракції j -ої дірки з валентної зони напівпровідника на j -рівень дискретного домішкового центру r -сорту, дорівнює:

$$\begin{aligned}
k_{rj}^h &= c_{rj}^h \cdot p = \delta^{-1} c_{rj}^h n_i \exp(-u_p - u_B + u) = \\
&= \delta^{-1} c_{rj}^h n_i \exp(\varphi_p + \varphi_B - Y) = \delta^{-1} c_{rj}^h n_i \exp(\varphi_p - \varphi).
\end{aligned} \tag{10}$$

Оскільки акцепторам відповідають від'ємні значення j , а донорам — додатні, співвідношення для ймовірності екстракції можна записати більш компактно у вигляді:

$$\begin{aligned}
k_{rj} &= \delta^{-z_j} c_{rj} n_i \exp[-z_j(u_\Delta + u_B - u)] = \\
&= \delta^{-z_j} c_{rj} n_i \exp[z_j(\varphi_\Delta + \varphi_B - Y)] = \delta^{-z_j} c_{rj} n_i \exp[z_j(\varphi_{n,p} - \varphi)],
\end{aligned} \tag{11}$$

де $z_j = \text{sign}(j)$,

$$\begin{aligned}
c_{rj} &= \{c_{rj}^e, \text{ якщо } j < 0; c_{rj}^h, \text{ якщо } j > 0\}; \\
u_\Delta &= \{u_N, \text{ якщо } j < 0; u_p, \text{ якщо } j > 0\}.
\end{aligned}$$

2.2. Ймовірність інжекції

Ймовірність інжекції домішковим центром r сорту j -го електрону в зону провідності, згідно з [4], дорівнює:

$$g_{rj}^e = c_{rj}^e n^0 (s^0 / b^0),$$

а j -ої дірки у валентну зону:

$$g_{rj}^h = c_{rj}^h p^0 (b^0 / s^0),$$

де індекс «0» вказує на термодинамічну рівновагу процесів; s , b — концентрація дефектів у станах S та B відповідно;

S — $(n + 1)$ -ий зарядовий стан дефекту;

B — його n -ний зарядовий стан.

Ураховуючи, що [5]:

$$b^0 / s^0 = \gamma_{rj} \exp[(E_{rj} - E_F)u_T^{1-}];$$

$$b^0 / s^0 = (1 / \gamma_{rj}) \exp[(E_{rj} - E_F)u_T^{1-}].$$

Отже, ми маємо можливість розрахувати коефіцієнт h_{rj} з використанням апроксимації (5) для довільного режиму переносу електронно-діркового газу в об'ємі напівпровідника. У даному розгляді обмежимося невинродженим випадком. Оскільки тоді:

$$n^0 = \delta n_i \exp\{(E_F - E_i)u_T^{1-}\};$$

$$p^0 = \delta^{-1} n_i \exp\{(-E_F - E_i)u_T^{1-}\},$$

то:

$$g_{rj}^e = \gamma_{rj} c_{rj}^e \delta n_i \exp[(E_{rj} - E_i)u_T^{1-}];$$

$$g_{rj}^h = (1 / \gamma_{rj}) c_{rj}^h \delta^{-1} n_i \exp[(-E_{rj} - E_i)u_T^{1-}].$$

Позначимо:

$$\Delta \varepsilon_{rj} = (E_{rj} - E_i) / u_T.$$

А тоді:

$$g_{rj}^e = \gamma_{rj} c_{rj}^e \delta n_i \exp[\Delta \varepsilon_{rj}];$$

$$g_{rj}^h = (1 / \gamma_{rj}) c_{rj}^h \delta^{-1} n_i \exp[-\Delta \varepsilon_{rj}].$$

Оскільки акцепторам відповідають від'ємні значення j , а донорам — додатні, співвідношення (9)–(10) можна записати у вигляді:

$$g_{rj} = (\gamma_{rj} \delta)^{-z_j} c_{rj} n_i \exp[-z_j \Delta \varepsilon_{rj}].$$

2.3. Температурна залежність коефіцієнтів екстракції та інжекції рухливих носіїв заряду

Позначимо:

$$G_{rj}^T = \delta^{-z_j} \sigma_{rj}(T) v_{e(h)}(T) n_i(T).$$

А тоді:

$$k_{rj} = \delta^{-z_j} G_{rj}^T \exp[-z_j (u_\Delta + u_B - u)];$$

$$g_{rj} = \gamma_{rj}^{-z_j} G_{rj}^T \exp(-z_j \Delta \varepsilon_{rj}).$$

Згідно з [6], температурні залежності компонент $\sigma_{ri}(T)$, $v_{e(h)}(T)$, $n_i(T)$ коефіцієнтів об'ємної квазіхімічної реакції визначають співвідношеннями:

$$\sigma_{rj}(T) = \sigma_{rj}^0 \exp\left(-\frac{\Delta E_{rj}^\sigma}{kT}\right);$$

$$\begin{aligned}
v_{e(h)}(T) &= v_{e(h)}^0 \sqrt{T}; \\
n_i(T) &= \sqrt{N_C N_V} \exp\left(-\frac{E_G}{2kT}\right); \\
N_C &= n_i^0 (aT)^{3/2} M_C^{1/2}; \\
N_V &= n_i^0 (bT)^{3/2},
\end{aligned}$$

де

$$a = \frac{m_n}{m_0};$$

$$b = \frac{m_p}{m_0};$$

$$v_{e(h)}^0 = \sqrt{\frac{3k}{m_{e(h)}^*}};$$

$$n_i^0 = 2 \sqrt{\left(\frac{2\pi m_0 k}{h^2}\right)^3} \cong 4,88 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} = 4,88 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}.$$

Тобто:

$$\begin{aligned}
\sqrt{N_C N_V} &= n_{i0} T \sqrt{T}; \\
n_{i0} &= n_{CV} = n_i^0 (ab)^{3/4} M_C^{1/4}; \\
n_i &= n_{CV} \sqrt{T^3} \exp\left(-\frac{E_G}{2kT}\right); \\
G_{rj}^T &= \delta^{-z_j} \sigma_{rj}(T) v_{e(h)}(T) n_i(T) = \\
&= \delta^{-z_j} \sigma_{rj}^0 v_{e(h)}^0 n_{CV} T^2 \exp\left(-\frac{E_G + 2\Delta E_{rj}^\sigma}{2kT}\right) = G_{rj}^0 T^2 \exp\left(-\frac{E_G + 2\Delta E_{rj}^\sigma}{2kT}\right),
\end{aligned}$$

де введено позначення:

$$G_{rj}^0 = \delta^{-z_j} \cdot \sigma_{rj}^0 \cdot v_{e(h)}^0 \cdot n_{CV}.$$

Таким чином,

$$G_{rj}^T = G_{rj}^0 T^2 \exp\left(-\frac{E_G + 2\Delta E_{rj}^\sigma}{2kT}\right).$$

2.4. Результуючі співвідношення для коефіцієнтів екстракції та інжекції

Таким чином, для коефіцієнтів об'ємної квазіхімічної реакції маємо:

$$\begin{aligned}
 k_{rj} &= \delta^{-z_j} c_{rj} n_i \exp[-z_j(u_\Delta + u_B - u)] = \\
 &= G_{rj}^T \exp[-z_j(u_\Delta + u_B - u)] = \\
 &= G_{rj}^T \exp[z_j(\varphi_\Delta + \varphi_B - Y)] = G_{rj}^T \exp[z_j(\varphi_{n,p} - \varphi)]; \\
 g_{rj} &= (\gamma_{rj} \delta)^{-z_j} c_{rj} n_i \exp[-z_j \Delta \varepsilon_{rj}] = \\
 &= \gamma_{rj}^{-z_j} G_{rj}^T \exp[-z_j \Delta \varepsilon_{rj}] = \gamma_{rj}^{-z_j} G_{rj}^T \exp\left[-z_j \frac{E_{rj} - E_i}{kT}\right],
 \end{aligned}$$

де $c_{rj} = \{c_{rj}^e, \text{ якщо } j < 0; c_{rj}^h, \text{ якщо } j > 0\}$;
 $u_\Delta = \{u_N, \text{ якщо } j < 0; u_P, \text{ якщо } j > 0\}$;
 $z_j = \text{sign}(j)$;

$$\begin{aligned}
 G_{rj}^T &= G_{rj}^0 T^2 \exp\left(-\frac{E_G + 2\Delta E_{rj}^\sigma}{2kT}\right); \\
 G_{rj}^0 &= \delta^{-z_j} \cdot \sigma_{rj}^0 \cdot \nu_{e(h)}^0 \cdot n_{CV}; \\
 \nu_{e(h)}^0 &= \sqrt{\frac{3k}{m_{e(h)}^*}}; \\
 n_{i0} &= n_{CV} = n_i^0 (ab)^{3/4} M_C^{1/4}; \\
 n_i^0 &= 2\sqrt{\left(\frac{2\pi m_o k}{h^2}\right)^3} \cong 4,88 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} = 4,88 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3}; \\
 u_N &= (F_n - E_F) u_T^{-1}; \\
 u_P &= (F_n - E_F) u_T^{-1}; \\
 u_B &= (E_F - E_i) u_T^{-1}; \\
 u &= (\psi_0 - \psi) \varphi_T^{-1}; \\
 \varphi_N &= (\psi_n - \psi_F) \varphi_T^{-1}; \\
 \varphi_P &= (\psi_p - \psi_F) \varphi_T^{-1}; \\
 Y &= (\psi - \psi_0) \varphi_T^{-1}; \\
 \varphi_B &= (\psi_F - \psi_0) \varphi_T^{-1};
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
Y_S &= (\psi_S - \psi_0) \varphi_T^{-1}; \\
\Delta \varepsilon_{rj} &= (E_{rj} - E_i) / u_T; \\
u_T &= kT, \varphi_T = kT / q = u_T q^{-1}.
\end{aligned}$$

Висновок. Виконана екстраполяція основних положень теорії [6] французьких вчених Жака Бургуена та Мішеля Ланно та реалізована адаптація їхніх концепцій у термінах формалізму нашого підходу.

РОЗДІЛ 3. УЗАГАЛЬНЕНА СТАТИСТИКА БАГАТОЗАРЯДНИХ ДОМІШКОВИХ ОБ'ЄМНИХ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ

3.1. Довільні умови стану електронно-діркового газу

Згідно з отриманими вище результатами, динаміку процесів, що відбуваються з домішковими центрами в об'ємі регулярної структури напівпровідникового шару, описують групою рівнянь:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} c_{rj} &= \nabla J_{rj}^A + \dot{e}_{rj}; \quad j = \overline{-1, n_r^-}; \\
\frac{\partial}{\partial t} c_{ro} &= \nabla J_{ro} + \dot{e}_{ro} + \dot{r}_{ro}^v; \quad j = 0; \\
\frac{\partial}{\partial t} c_{rj} &= \nabla J_{rj}^D + \dot{e}_{rj}; \quad j = \overline{1, n_r^+},
\end{aligned}$$

де ∇ — оператор набла;
 $J_{rj}^A, J_{rj}^D, J_{ro}$ — потоки часток домішкових центрів r -сорту у від'ємно (акцептори), додатньо (донори) зарядженому стані та в нейтральному стані відповідно;
 \dot{e}_{rj} — швидкість обміну зарядом домішкового центру r -сорту в j -му зарядовому стані із зоною провідності та з валентною зоною напівпровідника;
 \dot{r}_{ro}^v — швидкість об'ємних реакцій часток домішкових центрів r -сорту в нейтральному зарядовому стані.

У режимах, близьких до рівноважних, коли величини $\frac{\partial}{\partial t} c_{rj}, \dot{e}_{rj}, \dot{r}_{ro}^v$ можна вважати рівними нулю, та якщо градієнтами $\nabla J_{rj}^A, \nabla J_{rj}^D, \nabla J_{ro}$ можна знехтувати (∇J_{rj}), для кожного з r -сортів домішок, у загальному випадку отримуємо [8]:

$$k_{\alpha n_{\alpha}^{-}}^e N_{\alpha n_{\alpha}^{-}+1} - g_{\alpha n_{\alpha}^{-}}^e N_{\alpha n_{\alpha}^{-}} = 0; \quad n_r^{-} + 0;$$

$$k_{\alpha n_{\alpha}^{-}+1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^{-}+2} - g_{\alpha n_{\alpha}^{-}+1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^{-}+1} = 0; \quad n_r^{-} + 1;$$

...

$$k_{\alpha j-1}^e N_{\alpha j} - g_{\alpha j-1}^e N_{\alpha j-1} = 0, \quad j - 1;$$

$$k_{\alpha j}^e N_{\alpha j+1} - g_{\alpha j}^e N_{\alpha j} = 0, \quad j;$$

$$k_{\alpha j+1}^e N_{\alpha j+2} - g_{\alpha j+1}^e N_{\alpha j+1} = 0, \quad j + 1;$$

...

$$k_{\alpha-2}^e N_{\alpha-1} - g_{\alpha-2}^e N_{\alpha-2} = 0, \quad -2;$$

$$k_{\alpha-1}^e N_{\alpha 0} - g_{\alpha-1}^e N_{\alpha-1} = 0, \quad -1;$$

$$k_{\alpha 1}^h N_{\alpha 0} - g_{\alpha 1}^h N_{\alpha 1} = 0, \quad 1;$$

$$k_{\alpha 2}^h N_{\alpha 1} - g_{\alpha 2}^h N_{\alpha 2} = 0, \quad 2;$$

...

$$k_{\alpha j-1}^h N_{\alpha j-2} - g_{\alpha j-1}^h N_{\alpha j-1} = 0, \quad j - 1;$$

$$k_{\alpha j}^h N_{\alpha j-1} - g_{\alpha j}^h N_{\alpha j} = 0, \quad j;$$

$$k_{\alpha j+1}^h N_{\alpha j} - g_{\alpha j+1}^h N_{\alpha j+1} = 0, \quad j + 1;$$

...

$$k_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1}^h N_{\alpha n_{\alpha}^{+}-2} - g_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1} = 0, \quad n_r^{+} - 1;$$

$$k_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1}^h N_{\alpha n_{\alpha}^{+}-2} - g_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1} = 0, \quad n_r^{+}.$$

Таким чином, маємо систему $(n_r^{-} + n_r^{+})$ рівнянь, лінійну відносно $(n_r^{-} + n_r^{+} + 1)$ невідомих концентрацій C_{rj} зарядових станів домішкових центрів r -сорту. Очевидно:

$$N_{\alpha n_{\alpha}^{-}} = h_{\alpha n_{\alpha}^{-}}^e N_{\alpha n_{\alpha}^{-}+1}, \quad n_r^{-} + 0;$$

$$N_{\alpha n_{\alpha}^{-}} = h_{\alpha n_{\alpha}^{-}+1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^{-}+2}, \quad n_r^{-} + 1;$$

...

$$N_{\alpha j-1} = h_{\alpha j-1}^e N_{\alpha j}, \quad j - 1;$$

$$N_{\alpha j} = h_{\alpha j}^e N_{\alpha j+1}, \quad j;$$

$$N_{\alpha j+1} = h_{\alpha j+1}^e N_{\alpha j+2}, \quad j + 1;$$

...

$$N_{\alpha-2} = h_{\alpha-2}^e N_{\alpha-1}, \quad -2;$$

$$N_{\alpha-1} = h_{\alpha-1}^e N_{\alpha 0}, \quad -1;$$

$$N_{\alpha 1} = h_{\alpha 1}^h N_{\alpha 0}, \quad 1;$$

$$N_{\alpha 2} = h_{\alpha 2}^h N_{\alpha 1}, \quad 2;$$

...

$$N_{\alpha j-1} = h_{\alpha j-1}^h N_{\alpha j-2}, \quad j-1;$$

$$N_{\alpha j} = h_{\alpha j}^h N_{\alpha j-1}, \quad j;$$

$$N_{\alpha j+1} = h_{\alpha j+1}^h N_{\alpha j}, \quad j+1;$$

...

$$N_{\alpha n_{\alpha}^+-1} = h_{\alpha n_{\alpha}^+-1}^h N_{\alpha n_{\alpha}^+-2}, \quad n_r^+ - 1;$$

$$N_{\alpha n_{\alpha}^+-1} = h_{\alpha n_{\alpha}^+-1}^h N_{\alpha n_{\alpha}^+-2}, \quad n_r^+,$$

де

$$h_{\alpha j}^e = k_{\alpha j}^e / g_{\alpha j}^e, \quad (1.a)$$

$$h_{\alpha j}^h = k_{\alpha j}^h / g_{\alpha j}^h. \quad (1.b)$$

Або, виражаючи всі концентрації c_{rj} через концентрацію c_{r0} домішкових центрів r -сорту в нейтральному стані, отримаємо:

$$N_{\alpha n_{\alpha}^-} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha j+1}^e h_{\alpha j}^e h_{\alpha j-1}^e h_{\alpha n_{\alpha}^-+1}^e h_{\alpha n_{\alpha}^-}^e N_{\alpha 0}, \quad n_r^- + 0;$$

$$N_{\alpha n_{\alpha}^-+1} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha j+1}^e h_{\alpha j}^e h_{\alpha j-1}^e h_{\alpha n_{\alpha}^-+1}^e N_{\alpha 0}, \quad n_r^- + 1;$$

...

$$N_{\alpha j-1} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha j+1}^e h_{\alpha j}^e h_{\alpha j-1}^e N_{\alpha 0}, \quad j-1;$$

$$N_{\alpha j} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha j+1}^e h_{\alpha j}^e N_{\alpha 0}, \quad j;$$

$$N_{\alpha j+1} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha j+1}^e N_{\alpha 0}, \quad j+1;$$

...

$$N_{\alpha+2} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e N_{\alpha 0}, \quad -2;$$

$$N_{\alpha-1} = h_{\alpha-1}^e N_{\alpha 0}, \quad -1;$$

$$N_{\alpha 1} = h_{\alpha 1}^h N_{\alpha 0}, \quad 1;$$

$$N_{\alpha 2} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h N_{\alpha 0}, \quad 2;$$

...

$$N_{\alpha j-1} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h N_{\alpha 0}, \quad j-1;$$

$$N_{\alpha j} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h h_{\alpha j}^h N_{\alpha 0}, \quad j;$$

$$N_{\alpha j+1} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h h_{\alpha j}^h h_{\alpha j+1}^h N_{\alpha 0}, \quad j+1;$$

...

$$N_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h h_{\alpha j}^h h_{\alpha j+1}^h \dots h_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1}^h N_{\alpha 0}, \quad n_r^{+} + 1;$$

$$N_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h h_{\alpha j}^h h_{\alpha j+1}^h \dots h_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1}^h h_{\alpha n_{\alpha}^{+}}^h N_{\alpha 0}, \quad n_r^{+}.$$

Врахуємо, що повна концентрація c_r домішкових центрів r -сорту в об'ємі напівпровідника

$$N_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} N_{\alpha j}, \quad (2.a)$$

а їх повний вклад в об'ємний заряд

$$\xi_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} (jN_{\alpha j}). \quad (2.b)$$

Позначимо:

$$H_{\alpha j} = \prod_{k=z_j}^j h_{\alpha k}, \quad z_j = \text{sign}(j), \quad (3)$$

причому при $j = 0$, $H_{r0} = 1$. А тоді:

$$N_{\alpha j} = H_{\alpha j} N_{\alpha 0}, \quad (4)$$

так що:

$$N_{\alpha} = N_{\alpha 0} \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} H_{\alpha j} \quad (5)$$

та

$$\xi_{\alpha} = N_{\alpha 0} \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} (jH_{\alpha j}). \quad (6)$$

Позначимо:

$$D_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} H_{\alpha j}; \quad S_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} (jH_{\alpha j}); \quad (7)$$

$$D_{\alpha}^{-} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{-1} H_{\alpha j}; \quad S_{\alpha}^{-} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{-1} (jH_{\alpha j}); \quad (8)$$

$$D_{\alpha}^{+} = \sum_{j=1}^{n_{\alpha}^{+}} H_{\alpha j}; \quad S_{\alpha}^{+} = \sum_{j=1}^{n_{\alpha}^{+}} (jH_{\alpha j}). \quad (9)$$

Тобто виконуються наступні тотожності:

$$D_{\alpha} = D_{\alpha}^{-} + 1 + D_{\alpha}^{+}; \quad (10)$$

$$S_{\alpha} = S_{\alpha}^{-} + S_{\alpha}^{+}; \quad (11)$$

$$N_{\alpha} = D_{\alpha} N_{\alpha 0}; \quad (12)$$

$$\xi_{\alpha} = S_{\alpha} N_{\alpha 0} = SD_{\alpha} N_{\alpha}, \quad (13)$$

де

$$SD_{\alpha} = \frac{S_{\alpha}}{D_{\alpha}}. \quad (14)$$

Неважко побачити, що:

$$SD_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} j \frac{H_{\alpha j}}{H_{\alpha}}. \quad (15)$$

А тому доцільно ввести до розгляду функцію:

$$f_{\alpha k} = \frac{N_{\alpha k}}{N_{\alpha}}, \quad (16)$$

що визначає ту долю повного числа s_r домішкових центрів r -сорту, яка вміщує рівно k надлишкових електронів, якщо $k < 0$ (акцепторний рівень), чи ту їх частку, якій не вистачає рівно k електронів, якщо $k > 0$ (донорний рівень).

А тоді співвідношення для r -компоненти об'ємного заряду запишемо у вигляді:

$$\xi_{\alpha} = N_{\alpha} \sum_{k=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} (k f_{\alpha k}), \quad (17)$$

тобто:

$$SD_{\alpha} = \sum_{k=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} (k f_{\alpha k}). \quad (18)$$

Очевидно, враховуючи вирази (4) та (12),

$$f_{\alpha k} = \frac{H_{\alpha k}}{D_{\alpha}}. \quad (19)$$

Виконавши алгебраїчні перетворення із врахуванням співвідношення (7), отримаємо:

$$f_{\alpha k} = \frac{1}{\alpha_{\alpha k} + 1 + \beta_{\alpha k} + \gamma_{\alpha k}}, \quad (20)$$

де

$$\alpha_{\alpha k} = \sum_{\ell=z_k}^k \left\{ \prod_{j=\ell}^k \frac{1}{h_{\alpha j}} \right\}; \quad (21)$$

$$\beta_{\alpha k} = \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_{\alpha}} \left\{ \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j} \right\}; \quad (22)$$

$$\gamma_{\alpha k} = \frac{D_{\alpha}^{+}}{H_{\alpha k}}; \quad (23)$$

$$n_r^{\mu} = \{n_r^{-}, \text{ якщо } k < 0; n_r^{+}, \text{ якщо } k > 0\}; \quad (24)$$

$$D_r^{\pm} = \{D_r^{+}, \text{ якщо } k < 0; D_r^{-}, \text{ якщо } k > 0\}; \quad (25)$$

$$z_k = \text{sign}(k). \quad (26)$$

3.2. Перевірка коректності результатів

Покажемо, що результат (20)–(26) є коректним. Нехай $r = 1$. Позначимо:

$$h_{rj} = \{a_j, \text{ якщо } j < 0 \text{ (акцептори)}; b_j, \text{ якщо } j > 0 \text{ (донори)}\}. \quad (27)$$

А тоді:

$$\begin{aligned} D_r &= D = \\ &= a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k a_{k-1} \dots a_{n^{-}+1}a_{n^{-}} + a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k a_{k-1} \dots a_{n^{-}+1} + \\ &+ \dots + a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k a_{k-1} + a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k + a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1} + \\ &+ \dots + a_{-1}a_{-2} + a_{-1} + 1 + b_1 + b_1b_2 + \dots + \\ &+ b_1b_2 \dots b_{\ell-1} + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_{\ell} + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_{\ell}b_{\ell+1} + \dots + \\ &+ b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_{\ell}b_{\ell+1} \dots b_{n^{+}-1} + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_{\ell}b_{\ell+1} \dots b_{n^{+}-1}b_{n^{+}}. \end{aligned} \quad (28)$$

Якщо $k < 0$ (тобто k -ий рівень є акцепторним), то в (19) чисельник

$$H_{rk} = H_k = a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k. \quad (29)$$

Розділивши в (19) знаменник (28) дробу на чисельник (29), отримаємо:

$$\begin{aligned} D / H_k &= a_{k-1} \dots a_{n^{-}+1}a_n + \\ &+ a_{k-1} \dots a_{n^{-}+1} + \dots + a_{k-1} + 1 + a_k^{-1} + \\ &+ a_{k+1}^{-1}a_k^{-1} + \dots + a_{-3}^{-1} \dots a_{k+1}^{-1}a_k^{-1} + a_{-2}^{-1}a_{-3}^{-1} \dots a_{k+1}^{-1}a_k^{-1} + \\ &+ a_{-1}^{-1}a_{-2}^{-1}a_{-3}^{-1} \dots a_{k+1}^{-1}a_k^{-1} + D^{+} / H_k, \end{aligned} \quad (30)$$

де

$$\begin{aligned} D^{+} &= b_1 + b_1b_2 + \dots + b_1b_2 \dots b_{\ell-1} + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_{\ell} + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_{\ell}b_{\ell+1} + \\ &+ \dots + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_{\ell}b_{\ell+1} \dots b_{n^{+}-1} + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_{\ell}b_{\ell+1} \dots b_{n^{+}-1}b_{n^{+}}. \end{aligned}$$

Аналогічно, якщо $k > 0$ (тобто k -ий рівень є донорним), отримаємо для $k = 1$:

$$H_{r\ell} = H_\ell = b_1 b_2 \dots b_{\ell-1} b_\ell \quad (31)$$

та

$$\begin{aligned} D_r / H_{r\ell} &= D / H_\ell = \\ &= D^- / H_\ell + b_1^{-1} b_2^{-1} \dots b_{\ell-1}^{-1} b_\ell^{-1} + b_2^{-1} b_3^{-1} \dots b_{\ell-1}^{-1} b_\ell^{-1} + \\ &+ b_3^{-1} b_4^{-1} \dots b_{\ell-1}^{-1} b_\ell^{-1} + \dots + b_{\ell-1}^{-1} b_\ell^{-1} + b_\ell^{-1} + 1 + b_{\ell+1} + b_{\ell+1} b_{\ell+2} + \dots + \\ &+ b_{\ell+1} b_{\ell+2} \dots b_{n^+-1} + b_{\ell+1} b_{\ell+2} \dots b_{n^+-1} b_{n^+}, \end{aligned} \quad (32)$$

де

$$\begin{aligned} D^- &= a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} a_k a_{k-1} \dots a_{n^+-1} a_{n^+} + \\ &+ a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} a_k a_{k-1} \dots a_{n^+-1} + \dots + a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} a_k a_{k-1} + \\ &+ a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} a_k + a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} + \dots + a_{-1} a_{-2} + a_{-1}. \end{aligned}$$

Як бачимо, отримані вище загальні співвідношення для функції розподілу f_{rk} цілком коректні.

Зазначимо, що всі отримані до цього результати інваріантні по відношенню до того, виродженим чи не виродженим є електронно-дірковий газ в об'ємі напівпровідника, а також інваріантні стосовно місцеположення домішки — чи область просторового заряду, чи незбурений поверхнею об'єм напівпровідника.

3.3. Деталізація для випадку не виродженого напівпровідника

Якщо електронно-дірковий газ в об'ємі напівпровідника є не виродженим, то, враховуючи в (1) співвідношення (46) та (48), маємо:

$$\begin{aligned} h_{rj} &= (\gamma_{rj})^{z_j} \exp\{z_j(\Delta\varepsilon_{rj} - u_\Delta - u_B + u)\} = \\ &= (\gamma_{rj})^{z_j} \exp\{z_j(E_{rj} - F_{n,p} + qV)u_T^{-1}\} = \\ &= (\gamma_{rj})^{z_j} \exp\{z_j[(E_{rj} - F_{n,p})u_T^{-1} - Y]\}. \end{aligned} \quad (33)$$

Вираз (33) можна записати і в термінах потенціалів:

$$\begin{aligned} h_{rj} &= (\gamma_{rj})^{-z_j} \exp[z_j(\Delta\varepsilon_{rj} + \varphi_\Delta + \varphi_B - \varphi)] = \\ &= (\gamma_{rj})^{-z_j} \exp[z_j(\Delta\varepsilon_{rj} + \varphi_{n,p} - \varphi)]. \end{aligned} \quad (34)$$

Введемо позначення:

$$d_{\alpha j} = \{\gamma_{\alpha j} \exp(\Delta\varepsilon_{\alpha j})\}^{z_j}; \quad (35)$$

$$p_{\alpha j} = \prod_{k=z_j}^j d_{\alpha k}; \quad (36)$$

$$v = u_{\Delta} + u_B; \quad (37)$$

$$\Delta u_B = v - u. \quad (38)$$

А тоді:

$$h_{\alpha j} = d_{\alpha j} \exp(-z_j \Delta u_{BS}); \quad (39)$$

$$H_{\alpha j} = p_{\alpha j} \exp(-j \Delta u_{BS}), \quad (40)$$

оскільки

$$\prod_{k=z_j}^j \exp(-z_k \Delta u_{BS}) = \exp(-z_j |j| \Delta u_{BS}) = \exp(-j \Delta u_{BS}). \quad (41)$$

Якщо позначити

$$h_{\alpha j}(u_B) = d_{\alpha j} \exp(-z_j v); \quad (42)$$

$$H_{\alpha j}(u_B) = p_{\alpha j} \exp(-j v), \quad (43)$$

то

$$h_{rj}(\Delta u_B) = h_{rj}(u_B) \exp(z_j u); \quad (44)$$

$$H_{rj}(\Delta u_B) = H_{rj}(u_B) \exp(j u). \quad (45)$$

Зазначимо, що у системі змінних Г. П. Пеки [1] ці співвідношення мають вигляд:

$$h_{rj}^e(u_B) = h_{rj}^e(N, \lambda) = d_{rj} e^{z_j N} \lambda^{z_j}; \quad (46)$$

$$h_{rj}^h(u_B) = h_{rj}^h(P, \lambda) = d_{rj} e^{z_j P} \lambda^{z_j}; \quad (47)$$

$$H_{rj}^e(u_B) = H_{rj}^e(N, \lambda) = p_{rj} e^{jN} \lambda^j; \quad (48)$$

$$H_{rj}^h(u_B) = H_{rj}^h(P, \lambda) = p_{rj} e^{jP} \lambda^j \quad (49)$$

або, більш компактно,

$$h_{rj}(\lambda) = d_{rj} e^{z_j N(P)} \lambda^{z_j}; \quad (50)$$

$$H_{rj}(\lambda) = p_{rj} e^{jN(P)} \lambda^j \quad (51)$$

для незбуреної поверхнею області напівпровідника та

$$h_{rj}(\lambda, Y) = d_{rj} e^{z_j N(P)} \lambda^{z_j} e^{-z_j Y}; \quad (52)$$

$$H_{rj}(\lambda, Y) = p_{rj} e^{jN(P)} \lambda^j e^{-jY} \quad (53)$$

для приповерхневої області. Тут:

$$N = \beta(\Phi_N - \Phi_0);$$

$$P = \beta(\Phi_P - \Phi_0).$$

Підсумовуючи сказане, покажемо, як запишуться отримані вище многочлени (7) при їх деталізації на основі проведених викладок. Маємо:

$$D_r(u_B) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} p_{rj} \exp(-j\nu) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} H_{rj}(u_B); \quad (54)$$

$$S_r(u_B) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} j p_{rj} \exp(-j\nu) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} j H_{rj}(u_B); \quad (55)$$

$$D_\alpha(u_B, u_S) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} H_{\alpha j}(u_B) \exp(ju_S); \quad (56)$$

$$S_r(\Delta u_B) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} j H_{rj}(u_B) \exp(ju). \quad (57)$$

3.4. Порівняння з відомими класичними результатами

Покажемо, що отримані співвідношення у своїх часткових випадках збігаються із традиційно застосовуваними формулами. Так, Г. П. Пека [1] для опису об'ємного заряду ρ_{DA} , локалізованого на домішках в ОПЗ для декількох глибоких рівнів донорного типу пропонує співвідношення:

$$Q_{ss} = \sum_i \frac{qN_{id}^i}{\exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_F - \varepsilon_{id}^i] + Y_S\} + 1} - \sum_i \frac{qN_{ia}^i}{\exp\{-u_T^{-1}p[\varepsilon_F - \varepsilon_{ia}^i] - Y_S\} + 1}, \quad (58)$$

де N_{id} , N_{ia} , ε_{id} , ε_{ia} — концентрації та енергії іонізації донорів та акцепторів в однократно іонізованому стані;

Φ_0 — рівень хімічного потенціалу;

$\psi(x)$ — електростатичний потенціал.

Домножимо чисельник та знаменник кожного із дробів на величину, рівну оберненому першому доданку знаменника відповідного дробу:

$$\rho_{DA} = \sum_i \frac{\exp\{-\beta[\Phi_0 + \psi(x)] + u_T^{-1}\varepsilon_{id}\}}{1 + \exp\{-\beta[\Phi_0 + \psi(x)] + u_T^{-1}\varepsilon_{id}\}} N_{id} - \sum_i \frac{\exp\{\beta[\Phi_0 + \psi(x)] - u_T^{-1}\varepsilon_{ia}\}}{1 + \exp\{\beta[\Phi_0 + \psi(x)] - u_T^{-1}\varepsilon_{ia}\}} N_{ia}. \quad (59)$$

Тобто у термінах нашого викладу:

$$H_{i1}^d = \exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_{id}^i - \varepsilon_F] - Y_S\}; \quad (60)$$

$$H_{i1}^a = \exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_F - \varepsilon_{ia}^i] + Y_S\}. \quad (61)$$

Порівнюючи отримані вирази з формулами (33)–(53) та враховуючи, що шкали енергії та потенціалу взаємообернені, бачимо, що наші результати коректні.

3.5. Обчислення коефіцієнтів функції розподілу узагальненої статистики Фермі — Дірака

Розкриємо вирази для α_{rk} , β_{rk} , γ_{rk} у термінах формалізму (42)–(43) та виконаємо перетворення у співвідношеннях так, щоб забезпечити зручність у комп'ютерних розрахунках. Так, для незбуреної поверхнею області напівпровідника маємо:

$$\begin{aligned} \alpha_{rk}(u_B) &= \sum_{\ell=z_k}^k \prod_{j=\ell}^k h_{rj}^{-1}(u_B) = \sum_{\ell=z_k}^k \left\{ \prod_{j=\ell}^k d_{rj}^{-1} \prod_{j=\ell}^k \exp(z_j v) \right\} = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k \exp \left\{ \sum_{j=\ell}^k z_j v \right\} \prod_{j=\ell}^k d_{rj}^{-1} = \sum_{\ell=z_k}^k \exp\{(k - \ell + z_k)v\} \prod_{j=\ell}^k d_{rj}^{-1}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_{rk}(u_B) &= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_r} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{rj}(u_B) = \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_r} \left\{ \prod_{j=k+z_k}^{\ell} d_{rj} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} \exp(-z_j v) \right\} = \\ &= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_r} \exp \left\{ - \sum_{j=k+z_k}^{\ell} (z_j v) \right\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} d_{rj} = \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_r} \exp\{-(\ell - k)v\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} d_{rj} \end{aligned}$$

оскільки $(\lambda - (k + z_k) + z_k) = \lambda - k$;

$$\gamma_{rk}(u_B) = D_r^+(u_B) H_{rk}^{-1}(u_B) = D_r^{\pm}(u_B) p_{rk}^{-1} \exp(kv).$$

Аналогічно для області просторового заряду:

$$\begin{aligned} \alpha_{rk}(\Delta u_B) &= \sum_{\ell=z_k}^k \prod_{j=\ell}^k h_{rj}^{-1}(u_B, u) = \sum_{\ell=z_k}^k \left\{ \prod_{j=\ell}^k h_{rj}^{-1}(u_B) \prod_{j=\ell}^k \exp(-z_j u) \right\} = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k \exp \left\{ - \sum_{j=\ell}^k z_j u \right\} \prod_{j=\ell}^k h_{rj}^{-1}(u_B) = \sum_{\ell=z_k}^k \exp\{-(k - \ell + z_k)u\} \prod_{j=\ell}^k h_{rj}^{-1}(u_B) = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k \exp\{(k - \ell + z_k)(v - u)\} \prod_{j=\ell}^k d_{rj}^{-1}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\beta_{rk}(\Delta u_B) &= \sum_{l=k+z_k}^{\bar{n}_r} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{rj}(u_B, u) = \sum_{l=k+z_k}^{\bar{n}_r} \left\{ \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{rj}(u_B) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} \exp(z_j u) \right\} = \\
&= \sum_{l=k+z_k}^{\bar{n}_r} \exp \left\{ \sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_j u \right\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{rj}(u_B) = \sum_{l=k+z_k}^{\bar{n}_r} \exp \{(\ell - k)u\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{rj}(u_B) = \\
&= \sum_{l=k+z_k}^{\bar{n}_r} \exp \{-(\ell - k)(v - u)\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} d_{rj};
\end{aligned}$$

$$\gamma_{rk}(\Delta u_B) = D_{rk}^{\pm}(\Delta u_B) H_{rk}^{-1}(\Delta u_B) = D_{rk}^{\pm}(\Delta u_B) P_{rk}^{-1} \exp(k(v - u)),$$

де $Z_k = \text{sign}(k)$, $Z_j = \text{sign}(j)$.

ВИСНОВКИ

Таким чином, розглянуто статичний режим процесів перезарядки домішкових центрів в об'ємі напівпровідника. Отримано співвідношення, що описують повну концентрацію об'ємних домішкових центрів та їх повний вклад в об'ємний заряд через константи відповідних квазіхімічних реакцій цих центрів із зонами (провідності та валентною) напівпровідника. Введено до розгляду функцію f_{rk} , яка визначає долю іонізованих центрів r -сорту в k -зарядовому стані в їх повній концентрації та отримано відповідні співвідношення, що виражають її через параметри вищеозначених квазіхімічних реакцій. Виконано перевірку коректності отриманих виразів.

Для випадку невідродженого напівпровідника параметри квазіхімічних реакцій представлено в термінах зонної моделі твердого тіла та показано збіжність отриманих результатів в їх часткових випадках до традиційно застосовуваних співвідношень. Зауважимо, що, оскільки вираз (58) являє собою застосування елементарних статистик Фермі — Дірака, придатних для опису простих донорів та акцепторів, формули (20)–(23) можуть розглядатись як узагальнення статистики Фермі — Дірака на випадок кількох зарядних домішкових центрів.

Глава III

СТАТИСТИКА ЕЛЕКТРОНІВ ТА ДІРОК НА ПОВЕРХНІ МЕТАЛООКИСНОГО НАПІВПРОВІДНИКА

РОЗДІЛ 1. КОЕФІЦІЄНТИ ГЕТЕРОГЕННОЇ ПОВЕРХНЕВОЇ РЕАКЦІЇ

1.1. Коефіцієнти екстракції та інжекції рухливих носіїв заряду поверхневими електронними станами

Визначимо у межах зонної моделі напівпровідника константи квазіхімічних реакцій поверхневих електронних станів з рухливими носіями заряду, які фігурують у математичних моделях попередньої глави.

Ймовірність екстракції. У багатьох застосуваннях ситуація на поверхні виявляється подібною у плані формалізації [1] до об'ємного випадку. Отже, відповідно до результатів розділу 2 глави II, ймовірність екстракції поверхневим електронним станом α -сорту j -го електрону із зони провідності дорівнює:

$$k_{\alpha j}^e = c_{\alpha j}^e n_S,$$

а j -ої дірки з валентної зони:

$$k_{\alpha j}^h = c_{\alpha j}^h p_S,$$

де n_S, p_S — концентрації електронів та дірок у даній точці поверхні напівпровідника [2].

У даному розгляді обмежимося невивродженим випадком. Концентрації електронів та дірок у даній точці поверхні напівпровідника визначають тут співвідношення:

$$n_S = \delta n_i \exp(u_N + u_B - u_S);$$
$$p_S = \delta^{-1} n_i \exp(-u_P - u_B + u_S)$$

або:

$$n_S = \delta n_i \exp(-\varphi_N - \varphi_B + Y_S) = \delta n_i \exp(-\varphi_n + \varphi_S);$$
$$p_S = \delta^{-1} n_i \exp(\varphi_p + \varphi_B - Y_S) = \delta^{-1} n_i \exp(\varphi_p - \varphi_S).$$

А тоді ймовірність екстракції j -го електрону із зони провідності напівпровідника на j -рівень поверхневого електронного стану α -сорту дорівнює:

$$\begin{aligned} k_{\alpha j}^e &= c_{\alpha j}^e \cdot n_S = \delta c_{\alpha j}^e n_i \exp(u_N - u_B + u_S) = \\ &= \delta c_{\alpha j}^e n_i \exp(-\varphi_N - \varphi_B + Y_S) = \\ &= \delta c_{\alpha j}^e n_i \exp(-\varphi_n + \varphi_S), \end{aligned} \quad (1)$$

а ймовірність екстракції j -ої дірки з валентної зони напівпровідника на j -рівень поверхневого електронного стану α -сорту дорівнює:

$$\begin{aligned} k_{\alpha j}^h &= c_{\alpha j}^h \cdot p_S = \delta^{-1} c_{\alpha j}^h n_i \exp(-u_p - u_B + u_S) = \\ &= \delta^{-1} c_{\alpha j}^h n_i \exp(\varphi_p + \varphi_B - Y_S) = \\ &= \delta^{-1} c_{\alpha j}^h n_i \exp(\varphi_p - \varphi_S). \end{aligned} \quad (2)$$

Оскільки акцепторам відповідають від'ємні значення j , а донорам — додатні, співвідношення для ймовірності екстракції носія заряду поверхневим електронним станом α -сорту можна записати більш компактно у вигляді:

$$\begin{aligned} k_{\alpha j} &= \delta^{-z_j} c_{\alpha j} n_i \exp[-z_j(u_\Delta + u_B - u_S)] = \\ &= \delta^{-z_j} c_{\alpha j} n_i \exp[z_j(\varphi_\Delta + \varphi_B - Y_S)] = \\ &= \delta^{-z_j} c_{\alpha j} n_i \exp[z_j(\varphi_{n,p} - \varphi_S)]. \end{aligned} \quad (3)$$

Ймовірність інжекції. Ймовірність інжекції поверхневим електронним станом α -сорту j -го електрону в зону провідності дорівнює:

$$g_{\alpha j}^h = \gamma_{\alpha j} c_{\alpha j}^e \delta n_i \exp[\Delta \varepsilon_{\alpha j}], \quad (4)$$

а j -ої дірки у валентну зону:

$$g_{\alpha j}^h = (1 / \gamma_{\alpha j}) c_{\alpha j}^h \delta^{-1} n_i \exp[-\Delta \varepsilon_{\alpha j}], \quad (5)$$

де

$$\Delta \varepsilon_{\alpha j} = (E_{\alpha j} - E_i) u_T^{-1}. \quad (6)$$

Оскільки акцепторам відповідають від'ємні значення j , а донорам — додатні, співвідношення (4)–(5) можна записати у вигляді:

$$g_{\alpha j} = (\gamma_{\alpha j} \delta)^{-z_j} c_{\alpha j} n_i \exp[-z_j \Delta \varepsilon_{\alpha j}]. \quad (7)$$

Температурна залежність коефіцієнтів екстракції та інжекції рухливих носіїв заряду. Аналогічно об'ємному випадку для поверхні позначимо:

$$G_{\alpha j}^T = \delta^{-z_j} \sigma_{\alpha j}(T) v_{e(h)}(T) n_i(T).$$

А тоді:

$$k_{\alpha j} = G_{\alpha j}^T \exp[-z_j(u_{\Delta} + u_B - u)];$$

$$g_{\alpha j} = \gamma_{\alpha j}^{-z_j} G_{\alpha j}^T \exp(-z_j \Delta \varepsilon_{\alpha j}).$$

Відповідно до результатів попередньої глави, температурні залежності компонент $\sigma_{\alpha j}(T)$, $v_{e(h)}(T)$, $n_i(T)$ коефіцієнтів поверхневої квазіхімічної реакції визначають наведеними там співвідношеннями, причому:

$$\sigma_{\alpha j}(T) = \sigma_{\alpha j}^0 \exp\left(-\frac{\Delta E_{\alpha j}^{\sigma}}{kT}\right). \quad (8)$$

А тоді:

$$\begin{aligned} G_{\alpha j}^T &= \delta^{-z_j} \sigma_{\alpha j}(T) v_{e(h)}(T) n_i(T) = \\ &= \delta^{-z_j} \sigma_{\alpha j}^0 v_{e(h)}^0 n_{CV} T^2 \exp\left(-\frac{E_G + 2\Delta E_{\alpha j}^{\sigma}}{2kT}\right) = \\ &= G_{\alpha j}^0 T^2 \exp\left(-\frac{E_G + 2\Delta E_{\alpha j}^{\sigma}}{2kT}\right), \end{aligned}$$

де введено позначення:

$$G_{\alpha j}^0 = \delta^{-z_j} \cdot \sigma_{\alpha j}^0 \cdot v_{e(h)}^0 \cdot n_{CV}. \quad (9)$$

Отже,

$$G_{\alpha j}^T = G_{\alpha j}^0 T^2 \exp\left(-\frac{E_G + 2\Delta E_{\alpha j}^{\sigma}}{2kT}\right), \quad (10)$$

так що:

$$k_{\alpha j} = G_{\alpha j}^T \exp[-z_j(u_{\Delta} + u_B - u)];$$

$$g_{\alpha j} = \gamma_{\alpha j}^{-z_j} G_{\alpha j}^T \exp(-z_j \Delta \varepsilon_{\alpha j}).$$

Результуючі співвідношення для коефіцієнтів екстракції та інжекції. Таким чином, для коефіцієнтів гетерогенної квазіхімічної реакції поверхневих електронних станів із рухливими носіями заряду приповерхневої області напівпровідниково-го металоокислу маємо:

$$\begin{aligned} k_{\alpha j} &= \delta^{-z_j} c_{\alpha j} n_i \exp[-z_j(u_{\Delta} + u_B - u_S)] = \\ &= G_{\alpha j}^T \exp[-z_j(u_{\Delta} + u_B - u_S)] = G_{\alpha j}^T \exp[z_j(\varphi_{\Delta} + \varphi_B - Y_S)] = \\ &= G_{\alpha j}^T \exp[z_j(\varphi_{n,p} - \varphi_S)]; \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned}
g_{\alpha j} &= (\gamma_{\alpha j} \delta)^{-z_j} c_{\alpha j} n_i \exp[-z_j \Delta \varepsilon_{\alpha j}] = \\
&= \gamma_{\alpha j}^{-z_j} G_{\alpha j}^T \exp[-z_j \Delta \varepsilon_{\alpha j}] = \gamma_{\alpha j}^{-z_j} G_{\alpha j}^T \exp\left[-z_j \frac{E_{\alpha j} - E_i}{kT}\right], \quad (12)
\end{aligned}$$

де $c_{\alpha j} = \{c_{\alpha j}^e, \text{якщо } j < 0; c_{\alpha j}^h, \text{якщо } j > 0\}$;

$u_{\Delta} = \{u_N, \text{якщо } j < 0; u_P, \text{якщо } j > 0\}$;

$z_j = \text{sign}(j)$;

$$G_{\alpha j}^T = G_{\alpha j}^0 T^2 \exp\left(-\frac{E_G + 2\Delta E_{\alpha j}^{\sigma}}{2kT}\right);$$

$$G_{\alpha j}^0 = \delta^{-z_j} \cdot \sigma_{\alpha j}^0 \cdot v_{e(h)}^0 \cdot n_{CV};$$

$$v_{e(h)}^0 = \sqrt{\frac{3k}{m_{*e(h)}}};$$

$$n_{i0} = n_{CV} = n_i^0 (ab)^{3/4} M_C^{1/4};$$

$$n_i^0 = 2 \sqrt{\left(\frac{2\pi m_o k}{h^2}\right)^3} \cong 4,88 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3} = 4,88 \cdot 10^{21} \text{ m}^{-3};$$

$$\delta = \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} M_c^{1/4} = (m_n / m_p)^{3/4} M_c^{1/4};$$

$$u_N = (F_n - E_F) u_T^{-1};$$

$$u_P = (F_n - E_F) u_T^{-1};$$

$$u_B = (E_F - E_i) u_T^{-1};$$

$$u_S = (\psi_0 - \psi_S) \varphi_T^{-1};$$

$$\varphi_N = (\psi_n - \psi_F) \varphi_T^{-1};$$

$$\varphi_P = (\psi_p - \psi_F) \varphi_T^{-1};$$

$$Y_S = (\psi_S - \psi_0) \varphi_T^{-1};$$

$$\varphi_B = (\psi_F - \psi_0) \varphi_T^{-1};$$

$$u_T = kT;$$

$$\varphi_T = kT / q = u_T q^{-1};$$

$$\Delta \varepsilon_{\alpha j} = (E_{\alpha j} - E_i) u_T^{-1}.$$

1.2. Коефіцієнти гетерогенних хімічних реакцій

Фізична адсорбція. Важливою стадією кожної гетерогенної реакції є фізична адсорбція. Фізичною адсорбцією називають явище, за якого молекули адсорбату утримуються (на відстані порядку 0,3 нм) біля поверхні адсорбенту силами Ван-дер-Ваальса, унаслідок чого відбувається обмін енергією між твердим тілом та газом [3].

Пригадаємо основні припущення теорії фізичної адсорбції Ленгмюра [4], а саме:

1) адсорбція відбувається на окремих адсорбційних центрах, кожен з яких може утримувати на собі лише одну газову молекулу;

2) число адсорбційних центрів (усі вони — однієї природи) на поверхні є постійна величина, характерна для даної поверхні та обумовлена її біографією; загальне число центрів не змінюється з температурою та не залежить від заповнення поверхні адсорбента молекулами адсорбату;

3) кожен адсорбційний центр може зв'язуватись із даною молекулою лише одним певним чином, так що енергія зв'язку є однозначною характеристикою даного центру відносно даної молекули. За час перебування молекули в адсорбованому стані (на даному адсорбційному центрі) характер та міцність її зв'язку з адсорбційним центром не змінюється;

4) поверхня адсорбенту (твердого тіла) енергетично однорідна, тобто: а) включає у себе адсорбційні центри одного певного сорту, що характеризуються певною теплою адсорбції (однією і тією самою по відношенню до всіх центрів), тобто певною енергією зв'язку (однією і тією самою відносно всіх молекул даного сорту); б) ймовірність адсорбції та десорбції на довільній її ділянці однакова для даного сорту летючої речовини;

5) радіус дії адсорбційних сил дуже малий, так що адсорбуватись можуть лише ті молекули газу, які співударяються з поверхнею твердого тіла, а адсорбовані молекули не взаємодіють між собою. Тобто міцність зв'язку даної молекули з даним адсорбційним центром визначається лише природою молекули і природою адсорбційного центру, але не залежить від наявності чи відсутності молекул на сусідніх центрах.

М. Робертс та Ч. Макі [5] так деталізують процес взаємодії частки з газової фази з поверхнею твердого тіла: 1) при зіткненні з поверхнею адсорбенту частка з газової фази може зазнати пружного розсіювання та повернутися у газову фазу; 2) частка може

передати частку своєї кінетичної енергії (акомодація) поверхні твердого тіла і перейти у стан фізичної адсорбції (стан А); 3) якщо частка вже знаходиться у стані А, то її зв'язок із поверхнею коливально збуджений, але при подальшому обміні енергією з твердим тілом частка може потрапити на нижній рівень потенціальної ями А; 4) частка може потрапити на нижній рівень потенціальної ями А, якщо перескочить (поверхнева дифузія) на сусідній центр та втратить при цьому енергію збудження тощо, що в цілому не суперечить класичній теорії фізичної адсорбції Ленгмюра.

А тому, спираючись на основні постулати теорії Ленгмюра ми застосовуємо для констант адсорбції та десорбції $k_{\alpha}^A, k_{\alpha}^D$ традиційний формалізм:

$$k_{\alpha}^A = \frac{f_{\alpha}}{\sqrt{2\pi m_{\alpha} k T_g}}; f_{\alpha} = s_{\alpha} k_{\alpha}; \quad (13)$$

$$k_{\alpha}^D = \frac{1}{\tau_{\alpha}}; \tau_{\alpha} = \tau_0 \exp\left(\frac{Q_{\alpha}^A}{RT}\right), \quad (14)$$

де f_{α} — коефіцієнт акомодації часток α -газу;

k_{α} — ймовірність того, що газова молекула, яка потрапила на адсорбційний центр поверхні, виявиться закріпленою на ньому;

s_{α}, m_{α} — ефективна площа та маса молекули газу α -сорту;

Q_{α}^A — теплота десорбції (диференційна теплота адсорбції);

τ_0 — мінімальний час перебування молекули в адсорбованому стані.

Таким чином, величина

$$k_{\alpha}^A \left(N * - \sum_{k=1}^w \sum_{j=n_k^-}^{n_k^+} N_{kj} \right) \cdot P_{\alpha} \quad (15)$$

виражає собою число молекул, що надходять за одиницю часу із газової фази на одиницю площі поверхні адсорбенту, тоді як величина

$$k_{\alpha}^D N_{\alpha 0} \quad (16)$$

виражає собою число молекул, що залишають за одиницю часу одиницю площі поверхні адсорбенту, переходячи у газову фазу. Тобто, ми, додатково до основних постулатів теорії Ленгмюра, приймаємо в останньому виразі поправку Ф. Ф. Волькенштейна, згідно з якою десорбуються лише молекули адсорбату в нейтрально зарядженому стані з поверхневою концентрацією

$N_{\alpha 0}$. Відповідно до моделі М. Робертса та Ч. Макі [5] це означає, що десорбуються лише ті молекули, які знаходяться у стані А (де їх зв'язок з поверхнею коливально збуджений).

Тут N^* — загальна кількість адсорбційних центрів; p_α — парціальний тиск молекул газу α -сорту; $N_{\alpha 0}$, $N_{\alpha j}$ — число одиниць поверхневих станів α -сорту в нейтральному та j -му зарядовому стані відповідно.

Константи реакцій точкових дефектів. Для констант реакцій точкових дефектів ми дотримуємося формалізму робіт П. Кофстад [6]:

$$k = k_0 \exp\left(-\frac{\Delta H^0}{RT}\right); \quad (17)$$

$$k_0 = \exp\left(-\frac{\Delta S^0}{RT}\right); \quad (18)$$

$$\Delta G^0 = \Delta H^0 - T\Delta S^0, \quad (19)$$

де ΔG^0 — приріст вільної енергії системи за стандартних умов (при рівних одиниці значеннях коефіцієнтів активності компонентів реакції);

ΔH^0 , ΔS^0 — стандартний приріст ентальпії та ентропії.

Коефіцієнт дифузії. Дифузією називають [7] обумовлене хаотичним тепловим рухом атомів речовини їх перенесення, яке протікає в напрямку зменшення концентрації (антиградієнта). У кристалічній решітці вона реалізується за рахунок дискретних елементарних стрибків (взаємний обмін місцями, рух по вузлах за рахунок вакансій, переміщення по міжвузлях із заміщенням [8]).

Теоретично коефіцієнт дифузії визначають залежністю [7]:

$$D = va^2 \exp\left(-\frac{qW}{kT}\right), \quad (20)$$

де a — відстань між вузлами кристалічної решітки;

v — частота елементарних стрибків атома дифузанта;

W — висота потенціального бар'єра, який формують атоми кристала (приблизно 0,1 еВ).

У практичних розрахунках застосовують феноменологічну залежність:

$$D_v = D_0 \exp\left(-\frac{E_{AKT}}{kT}\right), \quad (21)$$

де $E_{\text{АКТ}}$ — енергія активації дифузійного процесу (необхідна для елементарного стрибка атома дифузанта);

D_0 — константа дифузії.

Наприклад, для миш'яку в кремнії $D_0 = 0,32 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$, $E_{\text{АКТ}} = 5,76 \cdot 10^{19} \text{ Дж}$ [7].

Домішки ділять на повільні та швидкі дифузанти [8]. Швидкими дифузантами є дефекти, які мігрують по міжвузлях (елементи ІА та ІВ — водень, літій, мідь, золото — у кремнії). Вони ж мають більш низьку енергію активації. Відповідно повільними дифузантами (більш низький — на кілька порядків — коефіцієнт дифузії) є домішки, які мігрують по вакансійному механізмі (елементи ІІІ та V груп, які виконують роль донорів та акцепторів у кремнії). Їх коефіцієнт дифузії, проте, у десять–сто разів перевищує коефіцієнт самодифузії (за даними для кремнію).

Істотним моментом є той факт, що часто наявність домішок та градієнти їх концентрації перетворюють D_0 та $E_{\text{АКТ}}$ у функції концентрації домішок та параметрів проведення процесу дифузії [8].

Коефіцієнт дифузії по границях зерен. Згідно з [9], слід відзначити такі основні риси дифузії по границях зерен: 1) це низькотемпературний процес (енергія активації його низька); 2) це швидкоплинний процес; 3) структура міжзернової границі (двійникові або малокутові границі) сильно впливають на анізотропію зернограничної дифузії, але не впливають істотно на її швидкість.

У практичних розрахунках для коефіцієнта зернограничної дифузії застосовують феноменологічну залежність:

$$D_{gb} = D_0 \exp\left(-\frac{E_{\text{АКТ}}}{kT}\right), \quad (22)$$

де $E_{\text{АКТ}}$ — енергія активації дифузійного процесу (необхідна для елементарного стрибка атома дифузанта);

D_0 — константа дифузії.

Експериментальні значення енергії активації зернограничної дифузії дорівнюють 0,4–0,7 від енергії активації об'ємної дифузії.

Коефіцієнт поверхневої дифузії. Багатократні дослідження підтверджують [6], що здебільшого коефіцієнти дифузії в об'ємі, по границях зерен та на поверхні зростають у ряду $D_v < D_{gb} < D_s$, а енергії активації зменшуються в ряду $\Delta H_v < \Delta H_{gb} < \Delta H_s$.

У практичних розрахунках для коефіцієнта поверхневої дифузії застосовують феноменологічну залежність:

$$D_s = D_0 \exp\left(-\frac{E_{\text{АКТ}}}{kT}\right), \quad (23)$$

де $E_{\text{АКТ}}$ — енергія активації дифузійного процесу (необхідна для елементарного стрибка атома дифузанта);

D_0 — константа дифузії.

Основними методами дослідження поверхневої дифузії є автоелектронна емісія, низькоенергетична електронографія, рифлення границь зерен. Однак саме поверхнева дифузія є найменш вивченим дифузійним процесом.

Розділ 2. УЗАГАЛЬНЕНА СТАТИСТИКА БАГАТОЗАРЯДНИХ ПОВЕРХНЕВИХ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ

2.1. Довільні умови стану електронно-діркового газу

Розглянемо статичні режими процесів хемосорбції газів та перезарядки поверхневих станів відповідно до математичних моделей, представлених у попередній главі. У більшості випадків для кожного з α -сортів поверхневих станів можна записати в умовах рівноваги [10]:

$$k_{\alpha n_{\alpha}^-}^e N_{\alpha n_{\alpha}^-+1} - g_{\alpha n_{\alpha}^-}^e N_{\alpha n_{\alpha}^-} = 0, \quad n_{\alpha}^- + 0;$$

$$k_{\alpha n_{\alpha}^-+1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^-+2} - g_{\alpha n_{\alpha}^-+1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^-+1} = 0, \quad n_{\alpha}^- + 1;$$

...

$$k_{\alpha j-1}^e N_{\alpha j} - g_{\alpha j-1}^e N_{\alpha j-1} = 0, \quad j - 1;$$

$$k_{\alpha j}^e N_{\alpha j+1} - g_{\alpha j-1}^e N_{\alpha j} = 0, \quad j;$$

$$k_{\alpha j+1}^e N_{\alpha j+2} - g_{\alpha j+1}^e N_{\alpha j+1} = 0, \quad j + 1;$$

...

$$k_{\alpha-2}^e N_{\alpha-1} - g_{\alpha-2}^e N_{\alpha-2} = 0, \quad -2;$$

$$k_{\alpha-1}^e N_{\alpha} - g_{\alpha-1}^e N_{\alpha-1} = 0, \quad -1;$$

$$k_{\alpha 1}^h N_{\alpha 0} - g_{\alpha 1}^h N_{\alpha 1} = 0, \quad 1;$$

$$k_{\alpha 2}^h N_{\alpha 1} - g_{\alpha 2}^h N_{\alpha 2} = 0, \quad 2;$$

...

$$k_{\alpha j-1}^h N_{\alpha j-2} - g_{\alpha j-1}^h N_{\alpha j-1} = 0, \quad j - 1;$$

$$k_{\alpha j}^h N_{\alpha j-1} - g_{\alpha j}^h N_{\alpha j} = 0, \quad j;$$

$$k_{\alpha j+1}^h N_{\alpha j} - g_{\alpha j+1}^h N_{\alpha j+1} = 0, \quad j+1;$$

...

$$k_{\alpha n_{\alpha}^+-1}^h N_{\alpha n_{\alpha}^+-2} - g_{\alpha n_{\alpha}^+-1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^+-1} = 0, \quad n_{\alpha}^+ - 1;$$

$$k_{\alpha n_{\alpha}^+-1}^h N_{\alpha n_{\alpha}^+-2} - g_{\alpha n_{\alpha}^+-1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^+-1} = 0, \quad n_{\alpha}^+ - 0.$$

Таким чином, маємо систему $(n_{\alpha}^- + n_{\alpha}^+)$ рівнянь, лінійну відносно $(n_{\alpha}^- + n_{\alpha}^+ + 1)$ невідомих концентрацій $N_{\alpha j}$ зарядових станів домішкових центрів α -сорту. Очевидно:

$$N_{\alpha n_{\alpha}^-} = h_{\alpha n_{\alpha}^-}^e N_{\alpha n_{\alpha}^-+1}, \quad n_{\alpha}^- + 0;$$

$$N_{\alpha n_{\alpha}^-} = h_{\alpha n_{\alpha}^-+1}^e N_{\alpha n_{\alpha}^-+2}, \quad n_{\alpha}^- + 1;$$

...

$$N_{\alpha j-1} = h_{\alpha j-1}^e N_{\alpha j}, \quad j-1;$$

$$N_{\alpha j} = h_{\alpha j}^e N_{\alpha j+1}, \quad j;$$

$$N_{\alpha j+1} = h_{\alpha j+1}^e N_{\alpha j+2}, \quad j+1;$$

...

$$N_{\alpha-2} = h_{\alpha-2}^e N_{\alpha-1}, \quad -2;$$

$$N_{\alpha-1} = h_{\alpha-1}^e N_{\alpha 0}, \quad -1;$$

$$N_{\alpha 1} = h_{\alpha 1}^h N_{\alpha 0}, \quad 1;$$

$$N_{\alpha 2} = h_{\alpha 2}^h N_{\alpha 1}, \quad 2;$$

...

$$N_{\alpha j-1} = h_{\alpha j-1}^h N_{\alpha j-2}, \quad j-1;$$

$$N_{\alpha j} = h_{\alpha j}^h N_{\alpha j-1}, \quad j;$$

$$N_{\alpha j+1} = h_{\alpha j+1}^h N_{\alpha j}, \quad j+1;$$

...

$$N_{\alpha n_{\alpha}^+-1} = h_{\alpha n_{\alpha}^+-1}^h N_{\alpha n_{\alpha}^+-2}, \quad n_{\alpha}^+ - 1;$$

$$N_{\alpha n_{\alpha}^+-1} = h_{\alpha n_{\alpha}^+-1}^h N_{\alpha n_{\alpha}^+-2}, \quad n_{\alpha}^+ - 0;$$

де

$$h_{\alpha j}^e = k_{\alpha j}^e / g_{\alpha j}^e; \quad (1.a)$$

$$h_{\alpha j}^h = k_{\alpha j}^h / g_{\alpha j}^h. \quad (1.b)$$

Або, виражаючи всі концентрації $N_{\alpha j}$ через концентрацію $N_{\alpha 0}$ домішкових центрів α -сорту в нейтральному стані, отримаємо:

$$N_{\alpha n_{\alpha}^{-}} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha+1}^e h_{\alpha j}^e h_{\alpha j-1}^e h_{\alpha n_{\alpha}^{-}+1} h_{\alpha n_{\alpha}^{-}} N_{\alpha 0}, \quad n_{\alpha}^{-} + 0;$$

$$N_{\alpha n_{\alpha}^{-}+1} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha+1}^e h_{\alpha j}^e h_{\alpha j-1}^e h_{\alpha n_{\alpha}^{-}+1} N_{\alpha 0}, \quad n_{\alpha}^{-} + 1;$$

...

$$N_{\alpha j-1} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha+1}^e h_{\alpha j}^e h_{\alpha j-1}^e N_{\alpha 0}, \quad j - 1;$$

$$N_{\alpha j} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha+1}^e h_{\alpha j}^e N_{\alpha 0}, \quad j;$$

$$N_{\alpha j+1} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e \dots h_{\alpha+1}^e N_{\alpha 0}, \quad j + 1;$$

...

$$N_{\alpha-2} = h_{\alpha-1}^e h_{\alpha-2}^e N_{\alpha 0}, \quad -2;$$

$$N_{\alpha-1} = h_{\alpha-1}^e N_{\alpha 0}, \quad -1;$$

$$N_{\alpha 1} = h_{\alpha 1}^h N_{\alpha 0}, \quad 1;$$

$$N_{\alpha 2} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h N_{\alpha 0}, \quad 2;$$

...

$$N_{\alpha j-1} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h N_{\alpha 0}, \quad j - 1;$$

$$N_{\alpha j} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h h_{\alpha j}^h N_{\alpha 0}, \quad j;$$

$$N_{\alpha j+1} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h h_{\alpha j}^h h_{\alpha j+1}^h N_{\alpha 0}, \quad j + 1;$$

...

$$N_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h h_{\alpha j}^h h_{\alpha j+1}^h \dots h_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1}^h N_{\alpha 0}, \quad n_{\alpha}^{+} - 1;$$

$$N_{\alpha n_{\alpha}^{+}} = h_{\alpha 1}^h h_{\alpha 2}^h \dots h_{\alpha j-1}^h h_{\alpha j}^h h_{\alpha j+1}^h \dots h_{\alpha n_{\alpha}^{+}-1}^h h_{\alpha n_{\alpha}^{+}}^h N_{\alpha 0}, \quad n_{\alpha}^{+} - 0.$$

Врахуємо, що повна концентрація N_{α} домішкових центрів α -сорту в об'ємі напівпровідника

$$N_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} N_{\alpha j}, \quad (2.a)$$

а їх повний вклад в об'ємний заряд

$$\xi_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} (j N_{\alpha j}). \quad (2.b)$$

Позначимо:

$$H_{\alpha j} = \prod_{k=z_j}^j h_{\alpha k}, \quad z_j = \text{sign}(j), \quad (3)$$

причому, при $j = 0$, $H_{\alpha 0} = 1$. А тоді:

$$N_{\alpha j} = H_{\alpha j} N_{\alpha 0} \quad (4)$$

так що:

$$N_{\alpha} = N_{\alpha 0} \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} H_{\alpha j} \quad (5)$$

та

$$\xi_{\alpha} = N_{\alpha 0} \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} (jH_{\alpha j}). \quad (6)$$

Позначимо:

$$D_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} H_{\alpha j}; \quad S_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} (jH_{\alpha j}); \quad (7)$$

$$D_{\alpha}^{-} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{-1} H_{\alpha j}; \quad S_{\alpha}^{-} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{-1} (jH_{\alpha j}); \quad (8)$$

$$D_{\alpha}^{+} = \sum_{j=1}^{n_{\alpha}^{+}} H_{\alpha j}; \quad S_{\alpha}^{+} = \sum_{j=1}^{n_{\alpha}^{+}} (jH_{\alpha j}). \quad (9)$$

Тобто виконуються наступні тотожності:

$$D_{\alpha} = D_{\alpha}^{-} + 1 + D_{\alpha}^{+}; \quad (10)$$

$$S_{\alpha} = S_{\alpha}^{-} + S_{\alpha}^{+}; \quad (11)$$

$$N_{\alpha} = D_{\alpha} N_{\alpha 0}; \quad (12)$$

$$\xi_{\alpha} = S_{\alpha} N_{\alpha 0} = S D_{\alpha} N_{\alpha}, \quad (13)$$

де

$$S D_{\alpha} = \frac{S_{\alpha}}{D_{\alpha}}. \quad (14)$$

Неважко побачити, що:

$$S D_{\alpha} = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} j \frac{H_{\alpha j}}{H_{\alpha}}. \quad (15)$$

А тому доцільно ввести до розгляду функцію:

$$f_{\alpha k} = \frac{N_{\alpha k}}{N_{\alpha}}, \quad (16)$$

яка визначає ту долю повного числа s_r домішкових центрів α -сорту, яка вміщує рівно k надлишкових електронів, якщо $k < 0$ (акцепторний рівень), чи ту їх частку, якій не вистачає рівно k електронів, якщо $k > 0$ (донорний рівень).

А тоді співвідношення для r -компоненти об'ємного заряду запишемо у вигляді:

$$\xi_\alpha = N_\alpha \sum_{k=n_\alpha^-}^{n_\alpha^+} (k f_{\alpha k}), \quad (17)$$

тобто

$$SD_\alpha = \sum_{k=n_\alpha^-}^{n_\alpha^+} (k f_{\alpha k}). \quad (18)$$

Очевидно, враховуючи вирази (4) та (12),

$$f_{\alpha k} = \frac{H_{\alpha k}}{D_\alpha}. \quad (19)$$

Виконавши алгебраїчні перетворення із врахуванням співвідношення (7), отримуємо:

$$f_{\alpha k} = \frac{1}{\alpha_{\alpha k} + 1 + \beta_{\alpha k} + \gamma_{\alpha k}}, \quad (20)$$

де

$$\alpha_{\alpha k} = \sum_{\ell=z_k}^k \left\{ \prod_{j=\ell}^k \frac{1}{h_{\alpha j}} \right\}; \quad (21)$$

$$\beta_{\alpha k} = \sum_{\ell=k+z_k}^{n_\alpha^+} \left\{ \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j} \right\}; \quad (22)$$

$$\gamma_{\alpha k} = \frac{D_\alpha^+}{H_{\alpha k}}; \quad (23)$$

$$n_\alpha^\pm = \{n_\alpha^-, \text{ якщо } k < 0; n_\alpha^+, \text{ якщо } k > 0\}; \quad (24)$$

$$D_\alpha^\pm = \{D_\alpha^+, \text{ якщо } k < 0; D_\alpha^-, \text{ якщо } k > 0\}; \quad (25)$$

$$z_k = \text{sign}(k). \quad (26)$$

2.2. Перевірка коректності результатів

Покажемо, що результат (20)–(26) є коректним. Нехай $\alpha = 1$. Позначимо:

$$h_{\alpha j} = \{a_j, \text{ якщо } j < 0 \text{ (акцептори)}; b_j, \text{ якщо } j > 0 \text{ (донори)}\}. \quad (27)$$

А тоді:

$$\begin{aligned} D_\alpha = D = & a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} a_k a_{k-1} \dots a_{n^+} a_{n^-} + \\ & + a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} a_k a_{k-1} \dots a_{n^+} + \dots + a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} a_k a_{k-1} + \\ & + a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} a_k + a_{-1} a_{-2} \dots a_{k+1} + \dots + a_{-1} a_{-2} + a_{-1} + 1 + b_1 + \\ & + b_1 b_2 + \dots + b_1 b_2 \dots b_{\ell-1} + b_1 b_2 \dots b_{\ell-1} b_\ell + b_1 b_2 \dots b_{\ell-1} b_\ell b_{\ell+1} + \dots + \\ & + b_1 b_2 \dots b_{\ell-1} b_\ell b_{\ell+1} \dots b_{n^+} + b_1 b_2 \dots b_{\ell-1} b_\ell b_{\ell+1} \dots b_{n^+} b_{n^+}. \end{aligned} \quad (28)$$

Якщо $k < 0$ (тобто k -рівень є акцепторним), то в (19) чисельник

$$H_{\alpha k} = H_k = a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k. \quad (29)$$

Розділивши в (19) знаменник (28) дробу на чисельник (29), отримаємо:

$$\begin{aligned} D/H_k &= a_{k-1} \dots a_{n^{-+}}a_n + a_{k-1} \dots a_{n^{-+}} + \dots + a_{k-1} + 1 + a_k^{-1} + \\ &+ a_{k+1}^{-1}a_k^{-1} + \dots + a_{-3}^{-1} \dots a_{k+1}^{-1}a_k^{-1} + a_{-2}^{-1}a_{-3}^{-1} \dots a_{k+1}^{-1}a_k^{-1} + \\ &+ a_{-1}^{-1}a_{-2}^{-1}a_{-3}^{-1} \dots a_{k+1}^{-1}a_k^{-1} + D^+ / H_k, \end{aligned} \quad (30)$$

де

$$\begin{aligned} D^+ &= b_1 + b_1b_2 + \dots + b_1b_2 \dots b_{\ell-1} + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_\ell + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_\ell b_{\ell+1} + \\ &+ \dots + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_\ell b_{\ell+1} \dots b_{n^+-1} + b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_\ell b_{\ell+1} \dots b_{n^+-1}b_{n^+}. \end{aligned}$$

Аналогічно, якщо $k > 0$ (тобто k -рівень є донорним), отримаємо для $k = 1$:

$$H_{\alpha \ell} = H_\ell = b_1b_2 \dots b_{\ell-1}b_\ell \quad (31)$$

та

$$\begin{aligned} D_\alpha / H_{r\ell} &= D / H_\ell = D^- / H_\ell + b_1^{-1}b_2^{-1} \dots b_{\ell-1}^{-1}b_\ell^{-1} + b_2^{-1}b_3^{-1} \dots b_{\ell-1}^{-1}b_\ell^{-1} + \\ &+ b_3^{-1}b_4^{-1} \dots b_{\ell-1}^{-1}b_\ell^{-1} + \dots + b_{\ell-1}^{-1}b_\ell^{-1} + b_\ell^{-1} + 1 + b_{\ell+1} + b_{\ell+1}b_{\ell+2} + \dots + \\ &+ b_{\ell+1}b_{\ell+2} \dots b_{n^+-1} + b_{\ell+1}b_{\ell+2} \dots b_{n^+-1}b_{n^+}, \end{aligned} \quad (32)$$

де

$$\begin{aligned} D^- &= a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k a_{k-1} \dots a_{n^{-+}}a_{n^-} + a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k a_{k-1} \dots a_{n^{-+}} + \dots + \\ &+ a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k a_{k-1} + a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1}a_k + a_{-1}a_{-2} \dots a_{k+1} + \dots + \\ &+ a_{-1}a_{-2} + a_{-1}. \end{aligned}$$

Як бачимо, отримані вище загальні співвідношення для функції розподілу $f_{\alpha k}$ цілком коректні.

Зазначимо, що всі отримані до цього результати інваріантні по відношенню до того, виродженим чи невиродженим є електронно-дірковий газ у приповерхневій області напівпровідника.

2.3. Деталізація для випадку невиродженого напівпровідника

У багатьох застосуваннях ситуація на поверхні виявляється подібною у плані формалізації до об'ємного випадку. Таким чином, по аналогії з результатами розділу 2 цієї глави (співвідношення (3.46) та (3.48)) можна записати:

$$k_{\alpha j} = (\delta)^{-z_j} c_{\alpha j} n_i \exp[-z_j(u_\Delta + u_B - u_S)];$$

$$g_{\alpha j} = (\gamma_{\alpha j} \delta)^{-z_j} c_{\alpha j} n_i \exp[-z_j \Delta \epsilon_{\alpha j}].$$

А тому, враховуючи в (1) ці співвідношення, маємо:

$$\begin{aligned} h_{\alpha j} &= (\gamma_{\alpha j})^{-z_j} \exp[z_j(\Delta \varepsilon_{\alpha j} - u_{\Delta} - u_B + u_S)] = \\ &= (\gamma_{\alpha j})^{-z_j} \exp[z_j u_T^{-1}(E_{\alpha j} - F_{n,p} + qV_S)] = \\ &= (\gamma_{\alpha j})^{-z_j} \exp[z_j[(E_{\alpha j} - F_{n,p})u_T^{-1} - Y_S]]. \end{aligned} \quad (33)$$

Вираз (57) можна записати і в термінах потенціалів:

$$\begin{aligned} h_{\alpha j} &= (\gamma_{\alpha j})^{-z_j} \exp[z_j(-\ddot{A}\varphi_{\alpha j} + \varphi_{\Delta} + \varphi_B - \varphi_S)] = \\ &= (\gamma_{\alpha j})^{-z_j} \exp[z_j(-\ddot{A}\varphi_{\alpha j} + \varphi_{n,p} - \varphi_S)]. \end{aligned} \quad (34)$$

Введемо позначення:

$$d_{\alpha j} = \{\gamma_{\alpha j} \exp(\Delta \varepsilon_{\alpha j})\}^{z_j}; \quad (35)$$

$$p_{\alpha j} = \prod_{k=z_j}^j d_{\alpha k}; \quad (36)$$

$$v = u_{\Delta} + u_B; \quad (37)$$

$$\Delta u_{BS} = v - u_S. \quad (38)$$

А тоді:

$$h_{\alpha j} = d_{\alpha j} \exp(-z_j \Delta u_{BS}); \quad (39)$$

$$H_{\alpha j} = p_{\alpha j} \exp(-j \Delta u_{BS}), \quad (40)$$

оскільки

$$\prod_{k=z_j}^j \exp(-z_k \Delta u_{BS}) = \exp(-z_j |j| \Delta u_{BS}) = \exp(-j \Delta u_{BS}). \quad (41)$$

Якщо позначити

$$h_{\alpha j}(u_B) = d_{\alpha j} \exp(-z_j v); \quad (42)$$

$$H_{\alpha j}(u_B) = p_{\alpha j} \exp(-jv), \quad (43)$$

то:

$$h_{\alpha j}(\Delta u_{BS}) = h_{\alpha j}(u_B) \exp(z_j u_S); \quad (44)$$

$$H_{\alpha j}(\Delta u_{BS}) = H_{\alpha j}(u_B) \exp(ju_S). \quad (45)$$

Зазначимо, що у системі змінних Г. П. Пеки [1] ці співвідношення мають вигляд:

$$h_{\alpha j}^e(u_B) = h_{\alpha j}^e(N, \lambda) = d_{\alpha j} \exp(-N) \lambda^{-1}; \quad (46)$$

$$h_{\alpha j}^h(u_B) = h_{\alpha j}^h(P, \lambda) = d_{\alpha j} \exp(P) \lambda; \quad (47)$$

$$H_{\alpha j}^e(u_B) = H_{\alpha j}^e(N, \lambda) = p_{\alpha j} \exp(jN) \lambda^j; \quad (48)$$

$$H_{\alpha j}^h(u_B) = H_{\alpha j}^h(N, \lambda) = p_{\alpha j} \exp(jP) \lambda^j, \quad (49)$$

де

$$\begin{aligned} N &= \beta(\Phi_N - \Phi_0); \\ P &= \beta(\Phi_P - \Phi_0). \end{aligned}$$

Або більш компактно:

$$h_{\alpha j}(\lambda) = h_{\alpha j}(u_B) = d_{\alpha j} e^{z_j N(P)} \lambda^{z_j}; \quad (50)$$

$$H_{\alpha j}(\lambda) = H_{\alpha j}(u_B) = d_{\alpha j} e^{jN(P)} \lambda^j \quad (51)$$

та

$$h_{\alpha j}(\lambda, Y_S) = h_{\alpha j}(\lambda) \exp(-z_j Y_S); \quad (52)$$

$$H_{\alpha j}(\lambda, Y_S) = H_{\alpha j}(\lambda) \exp(-j Y_S). \quad (53)$$

Підсумовуючи сказане, покажемо, як запишуться отримані вище многочлени (7) при їх деталізації на основі проведених викладок. Маємо:

$$D_{\alpha}(u_B) = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} p_{\alpha j} \exp(-j\nu) = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} H_{\alpha j}(u_B); \quad (54)$$

$$S_{\alpha}(u_B) = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} j p_{\alpha j} \exp(-j\nu) = \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} j H_{\alpha j}(u_B); \quad (55)$$

$$D_{\alpha}(u_B, u_S) = \sum_{j=n_r^{-}}^{n_r^{+}} H_{\alpha j}(u_B) \exp(ju_S); \quad (56)$$

$$S_{\alpha}(u_B, u_S) = \sum_{j=n_r^{-}}^{n_r^{+}} j H_{\alpha j}(u_B) \exp(ju_S). \quad (57)$$

2.4. Порівняння з відомими класичними результатами

Неважко переконатися, що отримані співвідношення у своїх часткових випадках збігаються із традиційно застосовуваними формулами. Так, Г. П. Пека [6] для опису заряду дискретного спектра поверхневих електронних станів донорного та акцепторного типу пропонує співвідношення:

$$\begin{aligned} Q_{SS} &= \sum_i \frac{qN_{td}^i}{\exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_F - \varepsilon_{td}^i] + Y_S\} + 1} - \\ &\quad - \sum_i \frac{qN_{ta}^i}{\exp\{-u_T^{-1}[\varepsilon_F - \varepsilon_{ta}^i] - Y_S\} + 1}, \end{aligned} \quad (58)$$

де N_{ta}^i , N_{td}^i , ε_{ta}^i , ε_{td}^i — концентрації та енергії іонізації донорів та акцепторів в однократно іонізованому стані.

Домножимо чисельник та знаменник кожного із дробів на величину, рівну оберненому першому доданку знаменника відповідного дробу:

$$Q_{SS} = \sum_i \frac{\exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_{id}^i - \varepsilon_F] - Y_S\}}{1 + \exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_{id}^i - \varepsilon_F] - Y_S\}} q N_{id}^i - \sum_i \frac{\exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_F - \varepsilon_{ia}^i] + Y_S\}}{1 + \exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_F - \varepsilon_{ia}^i] + Y_S\}} q N_{ia}^i. \quad (59)$$

Тобто у термінах нашого викладу:

$$H_{i1}^d = \exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_{id}^i - \varepsilon_F] - Y_S\}; \quad (60)$$

$$H_{i1}^a = \exp\{u_T^{-1}[\varepsilon_F - \varepsilon_{ia}^i] + Y_S\}. \quad (61)$$

Порівнюючи отримані вирази з формулами (33)–(53) та враховуючи, що шкали енергії та потенціалу взаємообернені, бачимо, що наші результати коректні.

2.5. Обчислення коефіцієнтів функції розподілу узагальненої статистики Фермі — Дірака

Розкриємо вирази для $\alpha_{\alpha k}$, $\beta_{\alpha k}$, $\gamma_{\alpha k}$ функції розподілу узагальненої статистики Фермі — Дірака в термінах формалізму наших позначень. Маємо:

$$\begin{aligned} \alpha_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \sum_{\ell=z_k}^k \prod_{j=\ell}^k (h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S)) = \sum_{\ell=z_k}^k \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) \prod_{j=\ell}^k \exp(-z_j u_S) = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k \exp\left(-\sum_{j=\ell}^k z_j u_S\right) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) = \sum_{\ell=z_k}^k \exp(-(k-\ell+z_k)u_S) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k \exp((k-\ell+z_k)(v-u_S)) \prod_{j=\ell}^k d_{\alpha j}^{-1}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \sum_{\ell=k+z_k}^{\mp} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S) = \sum_{\ell=k+z_k}^{\mp} \left\{ \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} \exp(z_j u_S) \right\} = \\ &= \sum_{\ell=k+z_k}^{\mp} \exp\left\{\sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_j u_S\right\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) = \sum_{\ell=k+z_k}^{\mp} \exp((\ell-k)u_S) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) = \\ &= \sum_{\ell=k+z_k}^{\mp} \exp(-(\ell-k)u_S) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) = \sum_{\ell=k+z_k}^{\mp} \exp(-(\ell-k)(v-u_S)) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} d_{\alpha j}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\Upsilon_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= D_{\alpha}^{\pm}(\Delta u_{BS})H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) = \\ &= D_{\alpha}^{\pm}(\Delta u_{BS})H_{\alpha k}^{-1}(u_B)\exp(-ku_S) = D_{\alpha}^{\pm}(\Delta u_{BS})p_{\alpha k}^{-1}\exp(k(v - u_S)),\end{aligned}$$

де $Z_k = \text{sign}(k)$, $Z_j = \text{sign}(j)$.

Розділ 3. ТОТОЖНОСТІ УЗАГАЛЬНЕНОЇ СТАТИСТИКИ БАГАТОЗАРЯДНИХ ПОВЕРХНЕВИХ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ

Похідні базових многочленів ($D_{\alpha}(u_S)$ та $S_{\alpha}(u_S)$) узагальненої статистики багатозарядних поверхневих електронних станів, отриманої у попередньому розділі, пов'язані між собою простими [11] співвідношеннями. Розглянемо їх.

Теорема 1. Похідну n -порядку по поверхневому потенціалу від співвідношення $D_{\alpha}(u_S)$ визначають залежністю:

$$\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} D_{\alpha}(u_B, u_S) = \frac{\partial^{n-1}}{\partial u_S^{n-1}} S_{\alpha}(u_B, u_S) = \sum_{j=n_{\alpha}^-}^{n_{\alpha}^+} j^n H_{\alpha j}(u_B, u_S).$$

Дійсно,

$$\frac{\partial}{\partial u_S} D_{\alpha}(u_B, u_S) = \sum_{j=n_{\alpha}^-}^{n_{\alpha}^+} j H_{\alpha j}(u_B) \exp(ju_S) = S_{\alpha}(u_B, u_S);$$

$$\frac{\partial^2}{\partial u_S^2} D_{\alpha}(u_B, u_S) = \sum_{j=n_{\alpha}^-}^{n_{\alpha}^+} j^2 H_{\alpha j}(u_B) \exp(ju_S) = \frac{\partial}{\partial u_S} S_{\alpha}(u_B, u_S);$$

...

$$\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} D_{\alpha}(u_B, u_S) = \sum_{j=n_{\alpha}^-}^{n_{\alpha}^+} j^n H_{\alpha j}(u_B) \exp(ju_S) = \frac{\partial^{n-1}}{\partial u_S^{n-1}} S_{\alpha}(u_B, u_S).$$

Теорема 2. Похідну n -порядку по поверхневому потенціалу від співвідношення $S_{\alpha}(u_S)$ визначають залежністю:

$$\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} S_{\alpha}(u_B, u_S) = \frac{\partial^{n+1}}{\partial u_S^{n+1}} D_{\alpha}(u_B, u_S) = \sum_{j=n_{\alpha}^-}^{n_{\alpha}^+} j^{n+1} H_{\alpha j}(u_B, u_S).$$

Дійсно,

$$\frac{\partial}{\partial u_S} S_{\alpha}(u_B, u_S) = \sum_{j=n_{\alpha}^-}^{n_{\alpha}^+} j^2 H_{\alpha j}(u_B) \exp(ju_S) = \frac{\partial^2}{\partial u_S^2} D_{\alpha}(u_B, u_S);$$

$$\frac{\partial^2}{\partial u_S^2} S_\alpha(u_B, u_S) = \sum_{j=n_\alpha}^+ j^3 H_{\alpha_j}(u_B) \exp(ju_S) = \frac{\partial^3}{\partial u_S^3} D_\alpha(u_B, u_S);$$

...

$$\frac{\partial^{n-1}}{\partial u_S^{n-1}} S_\alpha(u_B, u_S) = \sum_{j=n_\alpha}^+ j^n H_{\alpha_j}(u_B) \exp(ju_S) = \frac{\partial^n}{\partial u_S^n} D_\alpha(u_B, u_S);$$

$$\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} S_\alpha(u_B, u_S) = \sum_{j=n_\alpha}^+ j^{n+1} H_{\alpha_j}(u_B) \exp(ju_S) = \frac{\partial^{n+1}}{\partial u_S^{n+1}} D_\alpha(u_B, u_S).$$

Теорема 3. Похідну n -порядку по поверхневому потенціалу від співвідношення $SD_\alpha(u_S)$ визначають залежністю:

$$\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} SD_\alpha(u_S) = \frac{S_\alpha^{(n)}}{D_\alpha} + f_{(n)} + (-1)^n n! SD_\alpha^{n+1},$$

де компонент $f_{(n)}$ дається виразами виду:

$$f_{(1)} = 0, f_{(2)} = -3 \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha, f_{(3)} = -4 \frac{S''_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha - 3 \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} \right)^2 + 12 \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha^2.$$

Тобто для похідних від співвідношення $SD_\alpha(u_S)$ по поверхневому потенціалу мають місце такі формули:

$$\frac{\partial}{\partial u_S} SD_\alpha(u_S) = \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - SD_\alpha^2;$$

$$\frac{\partial^2}{\partial u_S^2} SD_\alpha(u_S) = \frac{S''_\alpha}{D_\alpha} - 3 \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha + 2SD_\alpha^3;$$

$$\frac{\partial^3}{\partial u_S^3} SD_\alpha(u_S) = \frac{S'''_\alpha}{D_\alpha} - 4 \frac{S''_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha - 3 \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} \right)^2 + 12 \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha^2 - 6SD_\alpha^4;$$

...

$$\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} SD_\alpha(u_S) = \frac{S_\alpha^{(n)}}{D_\alpha} + f_{(n)} + (-1)^n n! SD_\alpha^{n+1}.$$

Покажемо це. Дійсно:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_S} SD_\alpha(u_S) &= \frac{\partial}{\partial u_S} \left(\frac{S_\alpha(u_S)}{D_\alpha(u_S)} \right) = \frac{S'_\alpha D_\alpha - S_\alpha D'_\alpha}{D_\alpha^2} = \\ &= \frac{S'_\alpha D_\alpha - S_\alpha S'_\alpha}{D_\alpha^2} = \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - \left(\frac{S_\alpha}{D_\alpha} \right)^2 = \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - SD_\alpha^2; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial u_S^2} SD_\alpha(u_S) &= \frac{\partial}{\partial u_S} \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - \left(\frac{S_\alpha}{D_\alpha} \right)^2 \right) = \\
&= \frac{S''_\alpha D_\alpha - S'_\alpha D'_\alpha}{D_\alpha^2} - 2 \frac{S_\alpha}{D_\alpha} \left[\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - SD_\alpha^2 \right] = \\
&= \frac{S''_\alpha}{D_\alpha} - \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} \frac{S_\alpha}{D_\alpha} - 2 \frac{S_\alpha}{D_\alpha} \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} + 2 \frac{S_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha^2 = \frac{S''_\alpha}{D_\alpha} - 3 \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha + 2SD_\alpha^3;
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^3}{\partial u_S^3} SD_\alpha(u_B, u_S) &= \frac{\partial}{\partial u_S} \left(\frac{S''_\alpha}{D_\alpha} - 3 \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha + 2SD_\alpha^3 \right) = \\
&= \frac{S'''_\alpha D_\alpha - S''_\alpha D'_\alpha}{D_\alpha^2} - 3 \left[\left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} \right)' SD_\alpha + \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} (SD_\alpha)' \right] + 6SD_\alpha^2 (SD_\alpha)' = \\
&= \frac{S'''_\alpha}{D_\alpha} - \frac{S''_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha - 3 \left[\frac{S'_\alpha D_\alpha - S'_\alpha D'_\alpha}{D_\alpha^2} SD_\alpha + \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - SD_\alpha^2 \right) \right] + \\
&\quad + 6SD_\alpha^2 \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - SD_\alpha^2 \right) = \frac{S'''_\alpha}{D_\alpha} - \frac{S''_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha - \\
&\quad - 3 \left(\frac{S''_\alpha D_\alpha}{D_\alpha^2} SD_\alpha - \frac{S'_\alpha D'_\alpha}{D_\alpha^2} SD_\alpha + \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} \right)^2 - \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha^2 \right) + \\
&\quad + 6 \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha^2 - 6SD_\alpha^3 = \frac{S'''_\alpha}{D_\alpha} - \frac{S''_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha - \\
&\quad - 3 \left(\frac{S''_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha - \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} \frac{S_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha + \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} \right)^2 - \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha^2 \right) + \\
&\quad + 6 \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha^2 - 6SD_\alpha^3 = \\
&\quad - 3 \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} \right)^2 + 12 \frac{S'_\alpha}{D_\alpha} SD_\alpha^2 - 6SD_\alpha^3;
\end{aligned}$$

...

$$\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} SD_\alpha(u_S) = \frac{S_\alpha^{(n)}}{D_\alpha} + f_{(n)} + (-1)^n n! \cdot SD_\alpha^{n+1}.$$

Теорема 4. Співвідношення $S_\alpha^{(n)}/D_\alpha$ визначають через функцію розподілу $f_{\alpha k}(\Delta u_{BS})$ поверхневих електронних станів (узгальнена функція Фермі — Дірака) залежністю:

$$\frac{S_{\alpha}^{(n)}(\Delta u_{BS})}{D_{\alpha}(\Delta u_{BS})} = \sum_{k=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} k^{n+1} \cdot f_{\alpha k}(\Delta u_{BS}).$$

Дійсно, неважко переконатися, що мають місце наступні співвідношення:

$$SD_{\alpha}(\Delta u_{BS}) = \frac{S_{\alpha}(\Delta u_{BS})}{D_{\alpha}(\Delta u_{BS})} = \sum_{k=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} k \cdot f_{\alpha k}(\Delta u_{BS});$$

$$\frac{S'_{\alpha}(\Delta u_{BS})}{D_{\alpha}(\Delta u_{BS})} = \sum_{k=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} k^2 \cdot f_{\alpha k}(\Delta u_{BS});$$

$$\frac{S''_{\alpha}(\Delta u_{BS})}{D_{\alpha}(\Delta u_{BS})} = \sum_{k=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} k^3 \cdot f_{\alpha k}(\Delta u_{BS});$$

...

$$\frac{S_{\alpha}^{(n)}(\Delta u_{BS})}{D_{\alpha}(\Delta u_{BS})} = \sum_{k=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} k^{n+1} \cdot f_{\alpha k}(\Delta u_{BS}).$$

Теорема 5. Для похідної першого порядку по поверхневому потенціалу від функції розподілу поверхневих електронних станів (узагальненої функції Фермі — Дірака)

$$f_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) = \frac{1}{\alpha_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) + 1 + \beta_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) + \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS})},$$

яка дається співвідношенням:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_S} f_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \\ &= - \frac{\frac{\partial}{\partial u_S} [\alpha_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) + 1 + \beta_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) + \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS})]}{(\alpha_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) + 1 + \beta_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) + \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}))^2}, \end{aligned}$$

справедливі такі залежності:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_S} \alpha_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \sum_{\ell=z_k}^k \left\{ -\sum_{j=\ell}^k z_j \right\} \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S) = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k (-(k - \ell + z_k)) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial u_S} \beta_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \sum_{\ell=k+z_k}^{n_{\alpha}^+} \left\{ \sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_k \right\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S) = \\ &= \sum_{\ell=k+z_k}^{n_{\alpha}^+} (-k + \ell) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S).\end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial u_S} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) = \left(S_{\alpha}^{\pm}(\Delta u_{BS}) - k D_{\alpha}^{\pm}(\Delta u_{BS}) \right) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}).$$

Покажемо це. Дійсно:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial u_S} \alpha_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \sum_{\ell=z_k}^k \frac{\partial}{\partial u_S} \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S) = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k \frac{\partial}{\partial u_S} \exp\left(-\sum_{j=\ell}^k z_j u_S\right) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k \frac{\partial}{\partial u_S} \exp\left(-(k - \ell + z_k) u_S\right) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k \left(-\sum_{j=\ell}^k z_j\right) \exp\left(-\sum_{j=\ell}^k z_j u_S\right) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k (-k - \ell + z_k) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) \exp\left(-(k - \ell + z_k) u_S\right) = \\ &= \sum_{\ell=z_k}^k \left\{ -\sum_{j=\ell}^k z_j \right\} \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S) = \sum_{\ell=z_k}^k (-k - \ell + z_k) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial u_S} \beta_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \sum_{\ell=k+z_k}^{n_{\alpha}^+} \frac{\partial}{\partial u_S} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S) = \\ &= \sum_{\ell=k+z_k}^{n_{\alpha}^+} \frac{\partial}{\partial u_S} \exp\left\{ \sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_k u_S \right\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) = \\ &= \sum_{\ell=k+z_k}^{n_{\alpha}^+} \frac{\partial}{\partial u_S} \exp\left(-(k - \ell) u_S\right) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) = \\ &= \sum_{\ell=k+z_k}^{n_{\alpha}^+} (-k + \ell) \exp\left(-(k - \ell) u_S\right) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) =\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} \left\{ \sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_k \right\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S) = \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} (-k + \ell) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S); \\
&\quad \frac{\partial}{\partial u_S} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) = \frac{\partial}{\partial u_S} (D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS})) = \\
&\quad = \frac{\partial}{\partial u_S} (D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) H_{\alpha k}^{-1}(u_B) \exp(-k u_S)) = \\
&= \frac{\partial}{\partial u_S} (D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS})) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) + D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) \frac{\partial}{\partial u_S} (H_{\alpha k}^{-1}(u_B) \exp(-k u_S)) = \\
&\quad = S_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) - k D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) = \\
&\quad = (S_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) - k D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS})) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}).
\end{aligned}$$

Теорема 6. Похідну n -порядку по поверхневу потенціалу від співвідношень $\alpha_{\alpha k}(\Delta u_{BS})$, $\beta_{\alpha k}(\Delta u_{BS})$, $\gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS})$ визначають залежностями:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \alpha_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= (-1)^n \sum_{\ell=z_k}^k \left\{ \sum_{j=\ell}^k z_j \right\}^n \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S) = \\
&= (-1)^n \sum_{\ell=z_k}^k (k - \ell + z_k)^n \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S); \\
\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \beta_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} \left\{ \sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_k \right\}^n \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S) = \\
&= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} (-k + \ell)^n \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S) = \\
&= \frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) = \left(\sum_{i=0}^n (-1)^i C_n^i (D_\alpha^\pm)^{(n-i)} k^i \right) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}).
\end{aligned}$$

Покажемо це. Дійсно:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \alpha_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \sum_{\ell=z_k}^k \frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S) = \\
&= \sum_{\ell=z_k}^k \frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \exp\left(-\sum_{j=\ell}^k z_j u_S\right) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) = \\
&= \sum_{\ell=z_k}^k \frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \exp(-(k - \ell + z_k) u_S) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\ell=z_k}^k \left(-\sum_{j=\ell}^k z_j \right)^n \exp \left(-\sum_{j=\ell}^k z_j u_S \right) \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) = \\
&= \sum_{\ell=z_k}^k (-k - \ell + z_k)^n \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B) \exp(-(k - \ell + z_k)u_S) = \\
&= (-1)^n \sum_{\ell=z_k}^k \left\{ \sum_{j=\ell}^k z_j \right\}^n \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S) = \\
&= (-1)^n \sum_{\ell=z_k}^k (k - \ell + z_k)^n \prod_{j=\ell}^k h_{\alpha j}^{-1}(u_B, u_S); \\
\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \beta_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} \frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S) = \\
&= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} \frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \exp \left\{ \sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_k u_S \right\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) = \\
&= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} \frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \exp(-(k - \ell)u_S) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) = \\
&= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} (-k + \ell)^n \exp(-(k - \ell)u_S) \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) = \\
&= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} \left\{ \sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_k \right\}^n \exp \left\{ \sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_k u_S \right\} \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B) = \\
&= \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} \left\{ \sum_{j=k+z_k}^{\ell} z_k \right\}^n \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S) = \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} (-k + \ell)^n \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S) = \\
&= (-1)^n \sum_{\ell=k+z_k}^{\bar{n}_\alpha} (k - \ell)^n \prod_{j=k+z_k}^{\ell} h_{\alpha j}(u_B, u_S).
\end{aligned}$$

Нарешті, для похідних по поверхневому потенціалу від співвідношення $\gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS})$ можна отримати:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial u_S} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= \frac{\partial}{\partial u_S} (D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS})) = \\
&= \frac{\partial}{\partial u_S} (D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) H_{\alpha k}^{-1}(u_B) \exp(-k u_S)) =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial}{\partial u_S} (D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS})) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) + D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) \frac{\partial}{\partial u_S} (H_{\alpha k}^{-1}(u_B) \exp(-ku_S)) = \\
&= S_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) - k D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) = \\
&= (S_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) - k D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS})) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}); \\
&\frac{\partial^2}{\partial u_S^2} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) = \frac{\partial}{\partial u_S} ((D_\alpha^{\prime\pm} - k D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS})) = \\
&= \frac{\partial}{\partial u_S} (D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) H_{\alpha k}^{-1}(u_B) \exp(-ku_S)) = \\
&= \frac{\partial}{\partial u_S} (S_\alpha^\pm - k D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1} + (S_\alpha^\pm - k D_\alpha^\pm) \frac{\partial}{\partial u_S} (H_{\alpha k}^{-1}(u_B) \exp(-ku_S)) = \\
&= (D_\alpha^{\prime\pm} - k D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) - k (D_\alpha^{\prime\pm} - k D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) = \\
&= (D_\alpha^{\prime\pm} - k D_\alpha^{\prime\pm} - k (D_\alpha^{\prime\pm} - k D_\alpha^\pm)) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) = \\
&= (D_\alpha^{\prime\pm} - 2k D_\alpha^{\prime\pm} - k^2 D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}); \\
&\frac{\partial^3}{\partial u_S^3} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) = \frac{\partial}{\partial u_S} ((D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 2k D_\alpha^{\prime\pm} + k^2 D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS})) = \\
&= \frac{\partial}{\partial u_S} (D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 2k D_\alpha^{\prime\pm} + k^2 D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1} + \\
&+ (D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 2k D_\alpha^{\prime\pm} + k^2 D_\alpha^\pm) \frac{\partial}{\partial u_S} (H_{\alpha k}^{-1}(u_B) \exp(-ku_S)) = \\
&= (D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 2k D_\alpha^{\prime\prime\pm} + k^2 D_\alpha^{\prime\pm}) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) - \\
&- k (D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 2k D_\alpha^{\prime\pm} + k^2 D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) = \\
&= (D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 2k D_\alpha^{\prime\pm} + k^2 D_\alpha^\pm - k (D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 2k D_\alpha^{\prime\pm} + k^2 D_\alpha^\pm)) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) = \\
&= (D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 2k D_\alpha^{\prime\pm} + k^2 D_\alpha^\pm - k D_\alpha^{\prime\prime\pm} + 2k^2 D_\alpha^{\prime\pm} - k^3 D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}) = \\
&= (D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 3k D_\alpha^{\prime\pm} + 3k^2 D_\alpha^\pm - k^3 D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}).
\end{aligned}$$

Отже, можна записати:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial u_S} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= (S_\alpha^\pm(\Delta u_{BS}) - k D_\alpha^\pm(\Delta u_{BS})) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}); \\
\frac{\partial^2}{\partial u_S^2} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= (D_\alpha^{\prime\pm} + 2k D_\alpha^{\prime\pm} - k^2 D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}); \\
\frac{\partial^3}{\partial u_S^3} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) &= (D_\alpha^{\prime\prime\pm} - 3k D_\alpha^{\prime\pm} + 3k^2 D_\alpha^\pm - k^3 D_\alpha^\pm) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS});
\end{aligned}$$

...

$$\frac{\partial^n}{\partial u_S^n} \gamma_{\alpha k}(\Delta u_{BS}) = \left(\sum_{i=0}^n (-1)^i C_n^i (D_\alpha^\pm)^{(n-i)} k^i \right) H_{\alpha k}^{-1}(\Delta u_{BS}).$$

ВИСНОВКИ

Таким чином, розглянуто статичні режими процесів перезарядки поверхневих електронних станів на поверхні напівпровідника. Отримано співвідношення, що описують повну концентрацію поверхневих електронних станів та їх повний вклад у поверхневий заряд через константи відповідних гетерогенних квазіхімічних реакцій цих станів із зонами (провідності та валентною) напівпровідника. Введено до розгляду функцію $f_{\alpha k}$, яка визначає долю іонізованих центрів α -сорту в k -зарядовому стані в їх повній концентрації та отримано відповідні співвідношення, що виражають її через параметри вищеозначених гетерогенних квазіхімічних реакцій. Виконано перевірку коректності знайдених виразів.

Для випадку невідродженого напівпровідника параметри гетерогенних квазіхімічних реакцій представлено в термінах зонної моделі твердого тіла та показано збіжність отриманих результатів в їх часткових випадках до традиційно застосовуваних співвідношень. Зауважимо, що, оскільки вираз (2.58) являє собою застосування елементарних статистик Фермі — Дірака, придатних для опису простих донорів та акцепторів, формули (2.20)–(2.23) можуть розглядатись із урахуванням виразів (2.50)–(2.54) як узагальнення статистики Фермі — Дірака на випадок кількох зарядних поверхневих центрів.

ГЛАВА IV

РОЗВ'ЯЗОК ОДНОВИМІРНОЇ КРАЄВОЇ ЗАДАЧІ ДЛЯ РІВНЯННЯ ПУАССОНА У ВИПАДКУ НАПІВПРОВІДНИКА З БАГАТОЗАРЯДНИМИ ДОМІШКОВИМИ ЦЕНТРАМИ

Як теорія Гаррета — Браттайна [0.17], так і теорія хемосорбції Ф. Ф. Волькенштейна [0.15] не можуть бути безпосередньо застосовані для розрахунку процесів, що визначають метрологічні характеристики тонкоплівкових металоокисних сенсорів. У них не враховано, наприклад, наявність багатозарядних домішкових центрів на поверхні та в об'ємі матеріалу, обмежений розмір елементів структури напівпровідникового шару. А тому доцільно отримати розв'язок рівняння Пуассона, яке являє собою стрижень теорії, у достатньо загальній постановці.

Ми використаємо апроксимацію елементу структури матеріалу чутливого елементу сенсора нескінченною пластиною (див. рис. 4.1. а, 4.1. б) завтовшки $h = 2h_0$. Незважаючи на простоту, така апроксимація дає змогу розглянути широкий спектр задач. Дійсно, крім випадків, коли чутливий елемент має монокристалічну структуру або структуру типу «ажурна» сітка, така постановка задачі може бути застосована і для полікристалічних плівок зі стовбчатою, наприклад, структурою. Тоді поверхня пластини моделює міжзеренні границі, причому задача є осесиметричною відносно серединної площини (див. рис. 4.1. а). Осью симетрії задача може мати і у випадку структури типу «ажурна» сітка, якщо поверхневий заряд на обох поверхнях (чільній та внутрішній) однаковий. У цьому разі вона, по суті, аналогічна постановці для монокристалічної плівки за рівного нуля поверхневого заряду на внутрішній, суміжній з основою, границі.

РОЗДІЛ 1. ПЕРШИЙ ІНТЕГРАЛ КРАЄВОЇ ЗАДАЧІ І НАПРУЖЕНІСТЬ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ В ЕЛЕМЕНТАХ СТРУКТУРИ НАПІВПРОВІДНИКОВОГО ШАРУ

Постановка задачі. Розглянемо (див. рис. 4.1. а, 4.1. б) шар напівпровідника завтовшки $h = 2h_0$, в об'ємі якого наявні ν домішкових центри, кожен з яких створює кілька зарядових станів

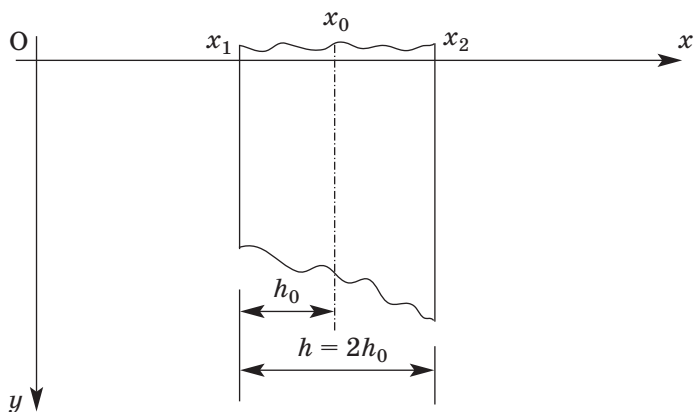


Рис. 4.1. а. Одновимірна апроксимація полікристалічної структури. Симетричні граничні умови $Q_{S1} = Q_{S2}$

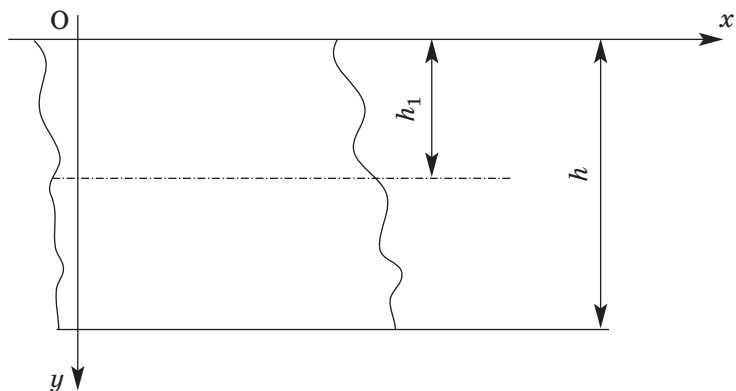


Рис. 4.1. б. Одновимірна апроксимація структури без потенціальних бар'єрів у напрямку переносу електричних зарядів. Несиметричні умови $Q_{S1} = Q_{S2}$

у забороненій зоні (далі — багатозарядні домішкові центри). За незначних повздовжніх полів відповідна одновимірна краєва задача для рівняння Пуассона має вигляд [7]:

$$\chi u''(x) = \beta \rho(u), \quad (1.1)$$

за краєвих умов або:

$$\chi u'(x_1) = \beta Q_1, \quad \chi u'(x_2) = \beta Q_2, \quad (1.2)$$

або:

$$u(x_1) = u_1, \quad u(x_2) = u_2, \quad (1.3)$$

та додатковій умові:

$$u'(x_0) = 0, \quad u(x_0) = u_0, \quad (1.4)$$

де $x_0 \in [x_1, x_2]$ — деяка точка в об'ємі напівпровідника, в якій напруженість електричного поля дорівнює нулю;

$u = \beta(\psi_B - \psi)$ — безрозмірний вигин зон;

Q_1, Q_2 — величини поверхневого заряду в точках x_1 та x_2 відповідно;

$\rho(u)$ — об'ємний заряд, який дорівнює:

$$\rho(u) = q(p - n + \rho_{DA}(u)), \quad (1.5)$$

де n, p — концентрації рухливих носіїв заряду, рівні у відсутності виродження електронно-діркового газу,

$$n = \delta n_i \exp(u_N + u_B - u);$$

$$p = \delta^{-1} n_i \exp(-u_P - u_B + u)$$

або, якщо обмежитись умовами термодинамічної рівноваги та покласти $\delta = 1$,

$$n = n_i \exp(u_B - u) = n_i \exp(\Delta u_B); \quad (1.6.a)$$

$$p = n_i \exp(-u_B - u) = n_i \exp(-\Delta u_B); \quad (1.6.b)$$

$$\Delta u_B = u_B - u. \quad (1.6.c)$$

$\rho_{DA}(u)$ — ефективний заряд домішкових центрів, який дорівнює [1]:

$$\rho_{DA}(u) = \sum_{r=1}^v \xi_r(\Delta u_B) = \sum_{r=1}^v \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} j c_{rj}(\Delta u_B) = \sum_{r=1}^v \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} j c_{rj}(u_B, u); \quad (1.7.a)$$

$$\xi_r(\Delta u_B) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} j c_{rj}(\Delta u_B) = c_r S D_r(\Delta u_B) = c_{r0} S_r(\Delta u_B). \quad (1.7.b)$$

Розв'язок. Застосуємо інтегруючий множник $\mu = 2u'$. Домноживши на нього обидві частини рівняння (1.1), отримаємо:

$$2u'[\chi u''(x)] = 2u'[\beta\rho(u)].$$

Але:

$$\frac{d}{dx}(u')^2 = \frac{d}{dx}(u_x)^2 = 2u_x u_{xx} = 2u'u''.$$

Тобто

$$\chi \frac{d}{dx}(u')^2 = 2\beta\rho(u) \frac{du}{dx}$$

або:

$$\chi d[(u')^2] = 2\beta\rho(u) du.$$

Звідки:

$$\int_{u'(x)}^{u'(x_0)} d[(u')^2] = \frac{2\beta}{\chi} \int_u^{u_0} \rho(u) du, \quad x_1 \leq x \leq x_0;$$

$$\int_{u'(x_0)}^{u'(x)} d[(u')^2] = \frac{2\beta}{\chi} \int_{u_0}^u \rho(u) du, \quad x_0 \leq x \leq x_2$$

та

$$(u')^2 \Big|_{u'(x)}^{u'(x_0)} = (u'(x_0))^2 - (u'(x))^2, \quad x_1 \leq x \leq x_0;$$

$$(u')^2 \Big|_{u'(x_0)}^{u'(x)} = (u'(x))^2 - (u'(x_0))^2, \quad x_0 \leq x \leq x_2.$$

А тоді:

$$(u'(x))^2 = -\frac{2\beta}{\chi} \int_u^{u_0} \rho(u) du = -qn_i \frac{2\beta}{\chi} \cdot \frac{1}{qn_i} \int_u^{u_0} \rho(u) du, \quad x_1 \leq x \leq x_0;$$

$$(u'(x))^2 = \frac{2\beta}{\chi} \int_{u_0}^u \rho(u) du = qn_i \frac{2\beta}{\chi} \cdot \frac{1}{qn_i} \int_{u_0}^u \rho(u) du, \quad x_0 \leq x \leq x_2.$$

Позначимо:

$$l_D = \sqrt{\frac{\chi}{2\beta qn_i}} = \sqrt{\frac{\chi kT}{2q^2 n_i}}; \quad (1.8)$$

$$F(u_0, u) = \sqrt{\frac{1}{qn_i} \int_{u_0}^u \rho(u) du}, \quad (1.9)$$

так що отримуємо:

$$u'(x) = \pm \frac{1}{l_D} F(u_0, u) \quad (1.10)$$

або:

$$\frac{du}{dx} = u'(x) = z_{S1} \frac{1}{l_D} F(u_0, u), x_1 \leq x \leq x_0; \quad (1.11.a)$$

$$\frac{du}{dx} = u'(x) = z_{S2} \frac{1}{l_D} F(u_0, u), x_0 \leq x \leq x_2, \quad (1.11.b)$$

де

$$\begin{aligned} z_{S1} &= \text{sign}(u'(x)|_{x=x_1}); \\ z_{S2} &= \text{sign}(u'(x)|_{x=x_2}). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Залежність потенціалу від координати. Отже:

$$\frac{du}{dx} = u'(x) = z_{S1} \frac{1}{l_D} F(u_0, u), x_1 \leq x \leq x_0;$$

$$\frac{du}{dx} = u'(x) = z_{S2} \frac{1}{l_D} F(u_0, u), x_0 \leq x \leq x_2.$$

Звідки:

$$dx = z_{S1} l_D \frac{1}{F(u_0, u)}, x_1 \leq x \leq x_0; \quad (1.13.a)$$

$$dx = z_{S2} l_D \frac{1}{F(u_0, u)}, x_0 \leq x \leq x_2. \quad (1.13.b)$$

Інтегруючи отримані вирази, маємо:

$$\int_x^{x_0} dx = z_{S1} l_D \int_u^{u_0} \frac{du}{F(u_0, u)}, x_1 \leq x \leq x_0;$$

$$\int_{x_0}^x dx = z_{S2} l_D \int_{u_0}^u \frac{du}{F(u_0, u)}, x_0 \leq x \leq x_2$$

або:

$$x_0 - x = z_{S1} l_D \int_u^{u_0} \frac{du}{F(u_0, u)}, x_1 \leq x \leq x_0;$$

$$x - x_0 = z_{S2} l_D \int_{u_0}^u \frac{du}{F(u_0, u)}, x_0 \leq x \leq x_2.$$

Тобто шукану залежність потенціалу від координати визначають співвідношеннями:

$$x = x_0 - z_{S1} l_D \int_u^{u_0} \frac{du}{F(u_0, u)}, \quad x_1 \leq x \leq x_0; \quad (1.14.a)$$

$$x = x_0 + z_{S2} l_D \int_{u_0}^u \frac{du}{F(u_0, u)}, \quad x_0 \leq x \leq x_2. \quad (1.14.b)$$

Очевидно, значення координати x_0 може бути визначене або за формулою:

$$x_0 = x_1 + z_{S1} l_D \int_{u_1}^{u_0} \frac{du}{F(u_0, u)},$$

або за формулою:

$$x_0 = x_2 - z_{S2} l_D \int_{u_0}^{u_2} \frac{du}{F(u_0, u)}.$$

А тоді потенціал u_0 у точці x_0 ($u_0 = u(x_0)$) визначають системою рівнянь:

$$x_0 - x_1 = z_{S1} l_D \int_{u_1}^{u_0} \frac{du}{F(u_0, u)}; \quad (1.15.a)$$

$$x_2 - x_0 = z_{S2} l_D \int_{u_0}^{u_2} \frac{du}{F(u_0, u)} \quad (1.15.b)$$

або нелінійним рівнянням:

$$\frac{x_2 - x_1}{l_D} = z_{S1} \int_{u_1}^{u_0} \frac{du}{F(u_0, u)} + z_{S2} \int_{u_0}^{u_2} \frac{du}{F(u_0, u)}. \quad (1.16)$$

Нарешті, враховуючи граничні умови (1.2), можна отримати замкнену систему нелінійних рівнянь, що визначають значення потенціалу в точках x_1, x_0, x_2 :

$$\begin{aligned} \frac{\beta l_D}{\chi} Q_1(u_1) - z_{S1} F(u_0, u_1) &= 0; \\ h_{ef} &= z_{S1} \int_{u_1}^{u_0} \frac{du}{F(u_0, u)} + z_{S2} \int_{u_0}^{u_2} \frac{du}{F(u_0, u)}; \\ \frac{\beta l_D}{\chi} Q_2(u_2) - z_{S2} F(u_0, u_2) &= 0, \end{aligned} \quad (1.17)$$

де

$$h_{ef} = \frac{x_2 - x_1}{l_D} = \frac{h}{l_D}. \quad (1.18)$$

Інтегрування функціоналу $F(u, u_0)$. Виконаємо інтегрування виразу (1.9):

$$F(u, u_0) = \left\{ \frac{1}{qn_i} \int_{u_0}^u \rho(u) du \right\}^{1/2}.$$

Враховуючи співвідношення (1.5), (1.6), (1.7), отримаємо:

$$\frac{1}{qn_i} \rho(u) = e^{-\Delta u_B} - e^{\Delta u_B} + \bar{\rho}_{DA}(u) = -2sh(\Delta u_B) + \bar{\rho}_{DA}(\Delta u_B),$$

де

$$\begin{aligned} \bar{\rho}_{DA}(\Delta u_B) &= \frac{1}{n_i} \sum_{r=1}^w \xi_r(\Delta u_B) = \frac{1}{n_i} \sum_{r=1}^v \xi_r(u_B, u) = \\ &= \frac{1}{n_i} \sum_{r=1}^v \sum_{j=\bar{n}_r}^{n_r^+} j c_{rj}(u_B, u) = \sum_{r=1}^v \sum_{j=\bar{n}_r}^{n_r^+} j \bar{c}_{rj}(u_B, u) = \sum_{r=1}^v \sum_{j=\bar{n}_r}^{n_r^+} j \bar{c}_{rj}(\Delta u_B) = \\ &= \frac{1}{n_i} \sum_{r=1}^v [c_r \cdot SD_r(u_B, u)] = \sum_{r=1}^v [\bar{c}_r \cdot SD_r(u_B, u)] = \sum_{r=1}^v [\bar{c}_r \cdot SD_r(\Delta u_B)] = \\ &= \frac{1}{n_i} \sum_{r=1}^v [c_{r0} \cdot S_r(u_B, u)] = \sum_{r=1}^v [\bar{c}_{r0} \cdot S_r(u_B, u)] = \sum_{r=1}^v [\bar{c}_{r0} \cdot S_r(\Delta u_B)]; \end{aligned}$$

$$\bar{\rho}_{DA}(u) = \frac{1}{n_i} \rho_{DA}(u);$$

$$\bar{c}_{rj} = \frac{c_{rj}}{n_i};$$

$$\bar{c}_r = \frac{c_r}{n_i};$$

$$\bar{c}_{r0} = \frac{c_{r0}}{n_i}.$$

А тоді:

$$\begin{aligned} \frac{1}{qn_i} \int_{u_0}^u \rho(u) du &= \int_{u_0}^u \frac{\rho(u)}{qn_i} du = \int_{u_0}^u (e^{-\Delta u_B} - e^{\Delta u_B}) du + \\ &+ \int \bar{\rho}_{DA}(e^{-\Delta u_B} - e^{\Delta u_B}) du = -2 \int sh(\Delta u_B) du + \int \bar{\rho}_{DA}(u) du. \end{aligned}$$

Інтеграл компонент рухливих носіїв заряду має вигляд:

$$\begin{aligned} \int_{u_0}^u (e^{-\Delta u_B} - e^{\Delta u_B}) du &= -2 \int_{u_0}^u sh(\Delta u_B) du = 2 \int_{\Delta u_{B0}}^{\Delta u_B} sh(\Delta u_B) d(\Delta u_B) = \\ &= 2ch(\Delta u_B) \Big|_{\Delta u_{B0}}^{\Delta u_B} = 2[ch(\Delta u_B) - ch(\Delta u_{B0})] = \\ &= e^{u_B} [e^{-u} - e^{-u_0}] + e^{-u_B} [e^u - e^{u_0}] = e^{u_B} e^{-u_0} (e^{-u+u_0} - 1) + \\ &+ e^{-u_B} e^{u_0} (e^{u-u_0} - 1) = e^{\Delta u_{B0}} (e^{-\Delta u} - 1) + e^{-\Delta u_{B0}} (e^{\Delta u} - 1), \end{aligned}$$

де $\Delta u = u - u_0$, $\Delta u_{B0} = u_B - u_0$. Інтеграл іонної компоненти об'ємного заряду:

$$\int_{u_0}^u \bar{\rho}_{DA}(u) du = \sum_{r=1}^v J_r(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) = \sum_{r=1}^v J_r(u_B, u_0, u),$$

де

$$\begin{aligned} J_r(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) &= J_r(u_B, u_0, u) = \int_{u_0}^u \bar{\xi}_r(u_B, u) du = \\ &= - \int_{\Delta u_{B0}}^{\Delta u_B} \bar{\xi}_r(\Delta u_B) d(\Delta u_B) = \bar{c}_r \int_{u_0}^u SD_r(u_B, u) du = -\bar{c}_r \int_{\Delta u_{B0}}^{\Delta u_B} SD_r(\Delta u_B) d(\Delta u_B). \end{aligned}$$

Як показано в 4 розділі II глави, має місце тотожність:

$$\frac{d}{du} D_r(u_B, u) = D'_r(u_B, u) = S_r(u_B, u).$$

А оскільки

$$\frac{d}{dx} \ln[f(x)] = \frac{f'(x)}{f(x)},$$

то:

$$\begin{aligned} \int_{u_0}^u SD_r(u_B, u) du &= \int_{u_0}^u \frac{D'_r(u_B, u)}{D_r(u_B, u)} du = \ln D_r(u_B, u) \Big|_{u_0}^u = \\ &= \ln D_r(u_B, u) - \ln D_r(u_B, u_0) = \ln \frac{D_r(u_B, u)}{D_r(u_B, u_0)} = \ln \frac{D_r(\Delta u_B)}{D_r(\Delta u_{B0})}. \end{aligned}$$

А тоді шукана складова вкладу об'ємного заряду набуває вигляду:

$$\begin{aligned} J_r(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) &= J_r(u_B, u_0, u) = \\ &= \bar{c}_r \ln \frac{D_r(u_B, u)}{D_r(u_B, u_0)} = \bar{c}_r \ln \frac{D_r(\Delta u_B)}{D_r(\Delta u_{B0})}. \end{aligned}$$

Як легко показати:

$$\begin{aligned} H_{rl}(u_B, u) &= H_{rl}(u_B) \cdot e^{lu} = \\ &= H_{rl}(u_B) \cdot e^{lu_0} e^{l(u-u_0)} = H_{rl}(u_B, u_0) \cdot e^{l\Delta u}, \end{aligned}$$

де $H_{rl}(u_B, u_0) = H_{rl}(u_B) \cdot e^{lu_0} = H_{rl}(\Delta u_{B0})$, $\Delta u = u - u_0$.

Враховуючи це, отриманий вираз можна представити так:

$$\begin{aligned} J_r(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) &= \bar{c}_r \ln \frac{\sum_{l=n_r^-}^{n_r^+} H_{rl}(\Delta u_{B0}) \cdot e^{l\Delta u}}{D_r(\Delta u_{B0})} = \bar{c}_r \ln \sum_{l=n_r^-}^{n_r^+} \frac{H_{rl}(\Delta u_{B0}) \cdot e^{l\Delta u}}{D_r(\Delta u_{B0})} = \\ &= \bar{c}_r \ln \sum_{l=n_r^-}^{n_r^+} \left(\frac{H_{rl}(\Delta u_{B0})}{D_r(\Delta u_{B0})} e^{l\Delta u} \right) = \bar{c}_r \cdot \ln \left(\sum_{l=n_r^-}^{n_r^+} f_{rl}(\Delta u_{B0}) e^{l\Delta u} \right), \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} f_{rl}(\Delta u_{B0}) &= \frac{H_{rl}(\Delta u_{B0})}{D_r(\Delta u_{B0})} = \frac{1}{\alpha_{rl}(\Delta u_{B0}) + 1 + \beta_{rl}(\Delta u_{B0}) + \gamma_{rl}(\Delta u_{B0})}; \\ f_{r0}(\Delta u_{B0}) &= \frac{1}{D_r(u_B, u_0)} = \frac{c_{r0}(u_B, u_0)}{c_r} \Big|_{u=u_0}. \end{aligned}$$

Таблиця 4.1

Правило знаків

Тип ОПЗ	шар збіднення		шар збагачення	
	п-	р-	п-	р-
Вигин зон	угору	вниз	угору	вниз
Знак Q_S	-	+	+	-
Знак u_S	+	-	-	+
Знак $F(u)$	-	+	+	-
z_{S1}	-	+	+	-
z_{S2}	+	-	-	+
Знак Y	-	+	+	-
Знак $F(Y)$	+	-	-	+

РОЗДІЛ 2. РОЗПОДІЛ ПОТЕНЦІАЛУ В НАПІВПРОВІДНИКОВІЙ ПЛАСТИНІ СУБМІКРОННИХ РОЗМІРІВ

У межах викладеного розглянемо деякі прості випадки, що дають змогу отримати аналітичне рішення [13]. Нехай в об'ємі напівпровідника створено такі умови, що залежністю об'ємного заряду від потенціалу можна знехтувати. Тобто має місце наближена рівність

$$\rho_{AD}(u) \approx \text{const}, \quad (2.1)$$

тоді вираз 1.9 набуває вигляду:

$$F(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) = \sqrt{2}\{ch(\Delta u_B) - ch(\Delta u_{B0}) + 0,5\rho_{AD} \cdot \Delta u\}^{1/2}. \quad (2.2)$$

Якщо тепер урахувати умову електронейтральності для незбуреної поверхнею області цього ж напівпровідника з таким же компонентним складом

$$\exp(-u_B) - \exp(-u_B) + \rho_{AD} = 0$$

та виразити звідси заряд іонів через заряд «рухливих» носіїв заряду, то можна отримати

$$F(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) = \sqrt{2}\{ch(\Delta u_B) - ch(\Delta u_{B0}) + sh(u_B)\Delta u\}^{1/2}, \quad (2.3)$$

де, як і раніше, $\Delta u_B = u_B - u$, $\Delta u_{B0} = u_B - u_0$, $\Delta u = u - u_0$. Тобто у цьому випадку ми прийшли до відомого [2] співвідношення для величини $F(\Delta u_B, \Delta u_{B0})$. Звичайно розрізняють п'ять [10] його класичних випадків, а саме:

$$\begin{aligned} F(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) \approx \{ \exp(\pm \Delta u_B) - \\ - \exp(\pm \Delta u_{B0}) + \exp(\pm u_B) \cdot \Delta u \}^{1/2}; \end{aligned} \quad (2.4.a)$$

при істотному перевищенні одного з типів провідності (електронного чи діркового):

$$F(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) \approx \sqrt{2}\{sh(u_B) \cdot \Delta u\}^{1/2}; \quad (2.4.b)$$

при збідненні, тобто, коли на поверхні n -напівпровідника (p -напівпровідника) розміщено великий від'ємний (додатній) заряд:

$$F(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) \approx \{ \exp(\pm \Delta u_B) - \exp(\pm \Delta u_{B0}) \}^{1/2}; \quad (2.4.c)$$

при збагаченні, тобто, коли на поверхні n -напівпровідника (p -напівпровідника) розміщено великий додатній (від'ємний) заряд:

$$F(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) \approx \sqrt{2}\{ch(\Delta u_B) - ch(\Delta u_{B0})\}^{1/2}; \quad (2.4.d)$$

при інверсії, тобто, коли на поверхні n -напівпровідника (p -напівпровідника) розміщено дуже великий від'ємний (додатній) заряд:

$$F(\Delta u_B, \Delta u_{B0}) \approx \sqrt{(u^2 - u_0^2)ch(u_B)} \quad (2.4.e)$$

при малих $|u| < 1$ вигинах зон.

У даному викладі розглянемо лише випадок збіднення та випадок малих вигинів зон. Для таких простих ситуацій неважко отримати аналітичні розв'язки для системи рівнянь (1.17).

1. *Збіднення поверхні основними носіями заряду.* Підставляючи співвідношення (2.4.b) у рівняння (1.16), отримаємо:

$$z_{S1} \int_{u_1}^{u_0} (u - u_0)^{-1/2} du + z_{S2} \int_{u_0}^{u_2} (u - u_0)^{-1/2} du = h_{ef} \sqrt{-z_{S1} 2sh(u_B)},$$

якщо $u_B > 0, u > 0$;

$$z_{S1} \int_{u_1}^{u_0} [-(u - u_0)]^{-1/2} du + z_{S2} \int_{u_0}^{u_2} [-(u - u_0)]^{-1/2} du = h_{ef} \sqrt{-z_{S1} 2sh(u_B)},$$

якщо $u_B < 0, u < 0$. Інтегруючи ці співвідношення, знайдемо:

$$-z_{S1} 2(u_1 - u_0)^{1/2} + z_{S2} 2(u_2 - u_0)^{1/2} = h_{ef} \sqrt{-z_{S1} 2sh(u_B)},$$

якщо $u_B > 0, u > 0$;

$$z_{S1} 2[-(u_1 - u_0)]^{1/2} + z_{S2} 2[-(u_2 - u_0)]^{1/2} = h_{ef} \sqrt{-z_{S1} 2sh(u_B)},$$

якщо $u_B < 0, u < 0$. Позначимо:

$$\chi = \frac{1}{2} h_{ef} \sqrt{-z_{S1} 2sh(u_B)} = \frac{h}{2l_D} \sqrt{-z_{S1} (e^{u_B} - e^{-u_B})} = \frac{h}{2l_{ef}};$$

$$l_{ef} = \frac{l_D}{\sqrt{-z_{S1} 2sh(u_B)}}. \quad (2.5)$$

А тоді, виконавши алгебраїчні перетворення в отриманих співвідношеннях, маємо:

$$u_0 = \frac{u_1 + u_2}{2} - \left(\frac{u_2 - u_1}{2\chi} \right)^2 - \left(\frac{\chi}{2} \right)^2, \quad (2.6.a)$$

якщо $u_B > 0, u > 0$, та

$$u_0 = \frac{u_1 + u_2}{2} + \left(\frac{u_2 - u_1}{2\chi} \right)^2 + \left(\frac{\chi}{2} \right)^2, \quad (2.6.b)$$

якщо $u_B < 0$, $u < 0$. Або, більш компактно:

$$u_0 = \frac{u_1 + u_2}{2} + z_{S1} \left(\frac{u_2 - u_1}{2\chi} \right)^2 + z_{S1} \left(\frac{\chi}{2} \right)^2. \quad (2.6.c)$$

Якщо задача осесиметрична, то:

$$u_0 = u_S + z_{S1} \left(\frac{\chi}{2} \right)^2$$

або:

$$u_S - u_0 = -z_{S1} \left(\frac{\chi}{2} \right)^2. \quad (2.7)$$

Залежність потенціалу від координати визначають співвідношеннями:

$$x = x_0 + z_{S1} 2l_{ef} \sqrt{u - u_0}; \quad x \in [x_1, x_0]; \quad (2.8.a)$$

$$x = x_0 + z_{S2} 2l_{ef} \sqrt{u - u_0}; \quad x \in [x_0, x_2]; \quad (2.8.b)$$

$$l_{ef} = \frac{l_D}{\sqrt{-z_{S1} 2sh(u_B)}},$$

якщо $u_B > 0$, $u > 0$, та

$$x = x_0 - z_{S1} 2l_{ef} \sqrt{u - u_0}; \quad x \in [x_1, x_0]; \quad (2.9.a)$$

$$x = x_0 - z_{S2} 2l_{ef} \sqrt{u - u_0}; \quad x \in [x_0, x_2], \quad (2.9.b)$$

якщо $u_B < 0$, $u < 0$. Ці ж співвідношення можуть бути записані більш компактно:

$$u - u_0 = \frac{-z_S sh(u_B)}{2l_D^2} (x - x_0)^2 = \frac{sh(u_B)}{2l_D^2} (x - x_0)^2, \quad (2.10.a)$$

якщо $u_B > 0$, $u > 0$, та

$$u - u_0 = \frac{-z_S sh(u_B)}{2l_D^2} (x - x_0)^2 = \frac{-sh(u_B)}{2l_D^2} (x - x_0)^2, \quad (2.10.b)$$

якщо $u_B < 0$, $u < 0$.

Координату, що відповідає значенню потенціалу u_0 , визначають системою рівнянь:

$$x_1 = x_0 + z_{S1} 2l_{ef} \sqrt{u_1 - u_0}; \quad (2.11.a)$$

$$x_2 = x_0 + z_{S2} 2l_{ef} \sqrt{u_2 - u_0}, \quad (2.11.b)$$

якщо $u_B > 0, u > 0$, та

$$x_1 = x_0 - z_{S1} 2l_{ef} \sqrt{u_1 - u_0}; \quad (2.11.c)$$

$$x_2 = x_0 - z_{S2} 2l_{ef} \sqrt{u_2 - u_0}, \quad (2.11.d)$$

якщо $u_B < 0, u < 0$. Або ж:

$$u_1 - u_0 = \frac{1}{4l_{ef}^2} (x_1 - x_0)^2 = \frac{-z_{S1} sh(u_B)}{2l_D^2} (x_1 - x_0)^2;$$

$$u_2 - u_0 = \frac{1}{4l_{ef}^2} (x_2 - x_0)^2 = \frac{-z_{S1} sh(u_B)}{2l_D^2} (x_2 - x_0)^2.$$

Розв'язок цієї системи рівнянь:

$$\frac{u_1 - u_0}{u_2 - u_0} = \frac{(x_1 - x_0)^2}{(x_2 - x_0)^2}$$

або:

$$x_0 = \frac{ax_2 - x_1}{a - 1}, \quad (2.12.a)$$

де

$$a = \sqrt{\frac{u_1 - u_0}{u_2 - u_0}}. \quad (2.12.b)$$

Очевидно, якщо заряд на протилежній стороні пластини відсутній, то

$$u_1 - u_0 = \frac{1}{4l_{ef}^2} h^2 = \frac{-z_{S1} sh(u_B)}{2l_D^2} h^2$$

або:

$$u_1 - u_0 = -z_{S1} \chi^2, \quad (2.13)$$

а якщо задача симетрична, то

$$u_1 - u_0 = \frac{1}{4l_{ef}^2} \left(\frac{h}{2}\right)^2 = \frac{h_0^2}{4l_{ef}^2} = \left(\frac{1}{2} \cdot \frac{h}{2l_{ef}}\right)^2 = \frac{-z_{S1} sh(u_B)}{2l_D^2} \left(\frac{h}{2}\right)^2$$

або:

$$u_1 - u_0 = -z_{S1} \left(\frac{\chi}{2}\right)^2. \quad (2.14)$$

2. *Малий вигин зон.* Підставляючи співвідношення (2.4.a) в рівняння (1.16), отримаємо:

$$z_{S1} \int_{u_1}^{u_0} (u^2 - u_0^2)^{-1/2} du + z_{S2} \int_{u_0}^{u_2} (u^2 - u_0^2)^{-1/2} du = h_{ef} \sqrt{ch(u_B)}.$$

Інтегруючи цей вираз, знайдемо:

$$\left| \frac{u_0}{u_1 + \sqrt{u_1^2 - u_0^2}} \right| \cdot \left| \frac{u_2 + \sqrt{u_2^2 - u_0^2}}{u_0} \right|^{z_1 z_2} = \gamma, \quad (2.15)$$

де

$$\gamma = \alpha^{z_1}, \alpha = h_{ef} \sqrt{ch(u_B)}. \quad (2.16)$$

1. Нехай $z_1 = z_2$. А тоді $\text{sign}(u_1) \neq \text{sign}(u_2)$ та

$$\left| \frac{u_0}{u_1 + \sqrt{u_1^2 - u_0^2}} \right| \cdot \left| \frac{u_2 + \sqrt{u_2^2 - u_0^2}}{u_0} \right| = \gamma$$

або:

$$\left| \frac{u_0}{u_1 + \sqrt{u_1^2 - u_0^2}} \cdot \frac{u_2 + \sqrt{u_2^2 - u_0^2}}{u_0} \right| = \gamma;$$

$$\left| u_2 + \sqrt{u_2^2 - u_0^2} \right| = \left| u_1 + \sqrt{u_1^2 - u_0^2} \right| \gamma;$$

а) якщо $u_1 < 0, u_2 > 0$, то:

$$u_2 + \sqrt{u_2^2 - u_0^2} = -\gamma u_1 - \gamma \sqrt{u_1^2 - u_0^2};$$

б) якщо $u_1 > 0, u_2 < 0$, то:

$$-u_2 - \sqrt{u_2^2 - u_0^2} = \gamma u_1 + \gamma \sqrt{u_1^2 - u_0^2}$$

або:

$$u_2 + \sqrt{u_2^2 - u_0^2} = -\gamma u_1 - \gamma \sqrt{u_1^2 - u_0^2}.$$

2. Нехай $z_1 \neq z_2$. А тоді $z_1 z_2 = -1$, так що завжди:

$$\left| \frac{u_0}{u_1 + \sqrt{u_1^2 - u_0^2}} \cdot \frac{u_0}{u_2 + \sqrt{u_2^2 - u_0^2}} \right| = \gamma$$

або:

$$\left| u_1 + \sqrt{u_1^2 - u_0^2} \right| \cdot \left| u_2 + \sqrt{u_2^2 - u_0^2} \right| = \frac{u_0^2}{\gamma}.$$

Виконавши алгебраїчні перетворення у цих співвідношеннях, знайдемо:

$$u_0^2 = -\frac{u_1 u_2}{a^2} - \left(\frac{u_1 + u_2}{b} \right)^2, \quad (2.17.a)$$

якщо $\text{sign}(u_1) \neq \text{sign}(u_2)$, $z_1 = z_2$, та

$$u_0^2 = \frac{u_1 u_2}{a^2} - \left(\frac{u_1 - u_2}{b} \right)^2, \quad (2.17.b)$$

якщо $\text{sign}(u_1) = \text{sign}(u_2)$, $z_1 \neq z_2$. Тут

$$a = ch \left(\frac{1}{2} z_1 h_{ef} \sqrt{ch(u_B)} \right);$$

$$b = sh \left(z_1 h_{ef} \sqrt{ch(u_B)} \right) \quad (2.17.c)$$

Неважко переконатися (див. табл. 4.1), що вирази 2.17 можна подати у «згорненому» вигляді [13]:

$$u_0^2 = -\frac{z_1 u_1 z_2 u_2}{a^2} - \left(\frac{u_1 + z_1 z_2 u_2}{b} \right)^2 \quad (2.18.a)$$

або:

$$u_0^2 = -z_1 u_1 \left\{ \frac{z_2 u_2}{a^2} + \left(z_1 + \frac{z_2 u_2}{u_1} \right)^2 \frac{z_1 u_1}{b^2} \right\}. \quad (2.18.b)$$

Відповідне потенціалу u_0 значення координати x_0 можна знайти зі співвідношень:

$$x_0 = x_1 + z_1 \frac{l_D}{\sqrt{ch(u_B)}} \ln \left| \frac{u_0}{u_1 + \sqrt{u_1^2 - u_0^2}} \right|; \quad (2.19.a)$$

$$x_0 = x_2 - z_2 \frac{l_D}{\sqrt{ch(u_B)}} \ln \left| \frac{u_2 + \sqrt{u_2^2 - u_0^2}}{u_0} \right|. \quad (2.19.b)$$

Залежність потенціалу від координати визначають формулами:

$$u = \pm ch \left\{ z_1 \frac{\sqrt{ch(u_B)}}{l_D} (x_0 - x) \right\} u_0, \quad x \in [x_1, x_0], \quad (2.20.a)$$

$$u = \pm ch \left\{ z_{21} \frac{\sqrt{ch(u_B)}}{l_D} (x - x_0) \right\} u_0, \quad x \in [x_0, x_2]. \quad (2.20.b)$$

Застосовуючи співвідношення (2.20), координата x_0 може бути знайдена з розв'язку наступної системи рівнянь:

$$u_1 = \pm ch \left\{ z_1 \frac{\sqrt{ch(u_B)}}{l_D} (x_0 - x_1) \right\} u_0;$$

$$u_2 = \pm ch \left\{ z_{21} \frac{\sqrt{ch(u_B)}}{l_D} (x_2 - x_0) \right\} u_0$$

або ж із відповідного нелінійного рівняння:

$$\frac{u_1}{u_2} = \pm \frac{ch \left\{ z_1 \frac{\sqrt{ch(u_B)}}{l_D} (x_0 - x_1) \right\}}{ch \left\{ z_{21} \frac{\sqrt{ch(u_B)}}{l_D} (x_2 - x_0) \right\}}. \quad (2.21)$$

Зазначимо, що у випадку симетрії, тобто при $u_1 = u_2$, отримані співвідношення дають:

$$u_0 = \frac{1}{a} u_S = sch \left(\frac{1}{2} z_1 h_{ef} \sqrt{ch(u_B)} \right) \cdot u_S, \quad (2.22)$$

а якщо заряд на одній із поверхонь рівний нулю (при цьому $u_2 = u_0$), то

$$u_0 = sch(z_1 h_{ef} \sqrt{ch(u_B)}) \cdot u_S. \quad (2.23)$$

Співвідношення (2.15)–(2.23) описують, незалежно від типу напівпровідника, наступні три достатньо загальні ситуації: а) на обох поверхнях сформовані шари збіднення; б) на обох поверхнях сформовані шари збагачення; в) на кожній з поверхонь сформовані шари протилежного типу.

РОЗДІЛ 3. ПРОВІДНІСТЬ МОНОКРИСТАЛІЧНОГО ШАРУ НАПІВПРОВІДНИКА СУБМІКРОННОЇ ТОВЩИНИ

Застосуємо отримані результати для розрахунку провідності напівпровідникової структури, яка не має потенціальних бар'єрів у напрямку перенесення носіїв заряду. Якщо впливом бокових поверхонь можна знехтувати, провідність плоскої пластини довжиною L , шириною a та висотою h можна розрахувати за формулою [14]:

$$G = G_0 + G_S = G_0 \left(1 + \frac{G_S}{G_0} \right) = G_0 \delta G, \quad (3.1)$$

де

$$\delta G = 1 + \frac{G_S}{G_0};$$

$$G_S = aL^{-1} \Delta \sigma_S;$$

$$G_0 = ahL^{-1} \sigma_V;$$

$$\frac{G_S}{G_0} = \frac{\Delta \sigma_S}{h \sigma_V};$$

$$\sigma_V = q\mu_p n_i \left(e^{-u_B} + b e^{u_B} \right);$$

$$\Delta\sigma_S = 2\Delta\sigma_{S0}(g_{S1} + g_{S2});$$

$$\Delta\sigma_{S0} = q\mu_{pS} n_i l_D c^{-1};$$

$$b = \frac{\mu_n}{\mu_p};$$

$$b_S = \frac{\mu_{nS}}{\mu_{pS}};$$

$c = \frac{1}{b_S} e^{-\frac{1}{2}u_B}$ — для n -напівпровідника та $c = e^{\frac{1}{2}u_B}$ — для p -напів-
провідника,

$$g_{S1} = z_{S1} \frac{1}{2} \int_{u_1}^{u_0} f(u) du;$$

$$g_{S2} = z_{S2} \frac{1}{2} \int_{u_0}^{u_2} f(u) du; \quad (3.2)$$

$$\varphi(u) = \frac{e^{-u_B}(e^u - 1) + b_S \cdot e^{u_B}(e^{-u} - 1)}{F(\Delta u_B, \Delta u_{B0})}; \quad (3.3)$$

$F(\Delta u_B, \Delta u_{B0})$ — визначають у загальному випадку співвідношенням 1.9. Отож,

$$\delta G = 1 + \frac{2\Delta\sigma_{S0}}{h\sigma_v}(g_{S1} + g_{S2}). \quad (3.4)$$

Отримані співвідношення дають змогу знайти аналітичні розв'язки, якщо розглянути напівпровідник з одним яскраво вираженим типом провідності. Тоді можна записати:

$$g_{S1} = z_{S1} \frac{1}{2} \int_{u_1}^{u_0} f(u) du; \quad (3.5.a)$$

$$g_{S2} = z_{S2} \frac{1}{2} \int_{u_0}^{u_2} f(u) du; \quad (3.5.b)$$

$$\frac{2\Delta\sigma_{S0}}{h\sigma_v} = \frac{\Delta b_S}{\chi}, \quad (3.6)$$

де

$$\chi = \frac{h}{2l_D e^{\frac{1}{2}u_B}}; \Delta b_S = \frac{\mu_{nS}}{\mu_n} \text{ — для } n\text{-напівпровідника}; \quad (3.7.a)$$

$$\chi = \frac{h}{2l_D e^{-\frac{1}{2}u_B}}; \Delta b_S = \frac{\mu_{pS}}{\mu_p} \text{ — для } p\text{-напівпровідника}; \quad (3.7.b)$$

$$f(u) = \frac{e^{+u} - 1}{\sqrt{e^{\mp u} \pm u - e^{\mp u_0} \mp u_0}}, \quad (3.8)$$

причому верхній знак відповідає випадку n -напівпровідника, а нижній — випадку p -напівпровідника. Отже,

$$\delta G = 1 + \frac{\Delta b_S}{\chi} (g_{S1} + g_{S2}). \quad (3.9)$$

1. Для n -напівпровідника інтеграли g_{Si} мають вигляд:

$$g_{S1} = z_{S1} \frac{1}{2} \int_{u_1}^{u_0} f_n(u) du; \quad (3.10.a)$$

$$g_{S2} = z_{S2} \frac{1}{2} \int_{u_0}^{u_2} f_n(u) du; \quad (3.10.b)$$

$$f_n(u) = \frac{e^{-u} - 1}{\sqrt{e^{-u} + u - e^{-u_0} - u_0}}. \quad (3.10.c)$$

Виконаємо заміну змінної:

$$y = \sqrt{e^{-u} + u - e^{-u_0} - u_0};$$

$$y^2 = e^{-u} + u - e^{-u_0} - u_0;$$

$$2y dy = -(e^{-u} - 1) du.$$

А тоді:

$$g_{S1} = z_{S1} \frac{1}{2} \int_{u_1}^{u_0} \frac{-2y dy}{y} = -z_{S1} \int_{u_1}^{u_0} dy = -z_{S1} y \Big|_{u_1}^{u_0} =$$

$$-z_{S1} \sqrt{e^{-u} + u - e^{-u_0} - u_0} \Big|_{u_1}^{u_0} = z_{S1} \sqrt{e^{-u_1} + u_1 - e^{-u_0} - u_0} =$$

$$\begin{aligned}
&= z_{S1} \sqrt{e^{-u_1} \left(1 - e^{u_1 - u_0}\right) + (u_1 - u_0)} = z_{S1} \sqrt{e^{-u_1} \left(1 - e^{\Delta u_{10}}\right) + \Delta u_{10}} = \\
&= z_{S1} \sqrt{\Delta u_{10} \left(1 - \frac{1}{\Delta u_{10}} \left(e^{\Delta u_{10}} - 1\right) e^{-u_1}\right)} = z_{S1} \sqrt{\Delta u_{10} \left(1 - A(\Delta u_{10}) e^{-u_1}\right)},
\end{aligned}$$

тобто

$$g_{S1} = z_{S1} \sqrt{\Delta u_{10} \left(1 - A(\Delta u_{10}) e^{-u_1}\right)}; \quad (3.11)$$

$$A(\Delta u_{10}) = \frac{1}{\Delta u_{10}} \left(e^{\Delta u_{10}} - 1\right).$$

Якщо $|\Delta u_{10}| \ll 1$, то:

$$A(\Delta u_{10}) \approx \frac{1}{\Delta u_{10}} (1 + \Delta u_{10} - 1) = 1$$

та

$$g_{S1} = z_{S1} \sqrt{\Delta u_{10} \left(1 - e^{-u_1}\right)}.$$

А якщо при цьому і $|u_1| \ll 1$, то:

$$g_{S1} \approx z_{S1} \sqrt{\Delta u_{10} (1 - (1 - u_1))} = z_{S1} \sqrt{\Delta u_{10}} \sqrt{u_1}.$$

Аналогічно:

$$\begin{aligned}
g_{S2} &= z_{S2} \frac{1}{2} \int_{u_0}^{u_2} \frac{-2y dy}{y} = -z_{S2} \int_{u_0}^{u_2} dy = -z_{S2} y \Big|_{u_0}^{u_2} = \\
&= -z_{S2} \sqrt{e^{-u} + u - e^{-u_0} - u_0} \Big|_{u_0}^{u_2} = -z_{S2} \sqrt{e^{-u_2} + u_2 - e^{-u_0} - u_0} = \\
&= -z_{S2} \sqrt{e^{-u_2} \left(1 - e^{u_2 - u_0}\right) + (u_2 - u_0)} = \\
&= -z_{S2} \sqrt{e^{-u_2} \left(1 - e^{\Delta u_{20}}\right) + \Delta u_{20}} = \\
&= -z_{S2} \sqrt{\Delta u_{20} \left(1 - \frac{1}{\Delta u_{20}} \left(e^{\Delta u_{20}} - 1\right) e^{-u_2}\right)} = \\
&= -z_{S2} \sqrt{\Delta u_{20} \left(1 - A(\Delta u_{20}) e^{-u_2}\right)},
\end{aligned}$$

тобто

$$g_{S2} = -z_{S2} \sqrt{\Delta u_{20} \left(1 - A(\Delta u_{20}) e^{-u_2} \right)};$$

$$A(\Delta u_{20}) = \frac{1}{\Delta u_{20}} \left(e^{\Delta u_{20}} - 1 \right). \quad (3.12)$$

Якщо $|\Delta u_{20}| \ll 1$, то:

$$A(\Delta u_{20}) \approx \frac{1}{\Delta u_{20}} (1 + \Delta u_{20} - 1) = 1$$

та

$$g_{S2} \approx z_{S2} \sqrt{\Delta u_{20} \left(1 - e^{-u_2} \right)}.$$

А якщо при цьому і $|u_2| \ll 1$, то:

$$g_{S2} \approx z_{S2} \sqrt{\Delta u_{20} (1 - (1 - u_2))} = z_{S1} \sqrt{\Delta u_{20}} \sqrt{u_2}.$$

2. Для p -напівпровідника, аналогічно, інтеграли g_{Si} мають вигляд:

$$g_{S1} = z_{S1} \frac{1}{2} \int_{u_1}^{u_0} f_p(u) du;$$

$$g_{S2} = z_{S2} \frac{1}{2} \int_{u_0}^{u_2} f_p(u) du;$$

$$f_p(u) = \frac{e^u - 1}{\sqrt{e^u - u - e^{u_0} + u_0}}.$$

Виконаємо заміну змінної:

$$y = \sqrt{e^u - u - e^{u_0} + u_0};$$

$$y^2 = e^u - u - e^{u_0} + u_0;$$

$$2y dy = (e^u - 1) du.$$

А тоді:

$$g_{S1} = z_{S1} \frac{1}{2} \int_{u_1}^{u_0} \frac{2y dy}{y} = z_{S1} \int_{u_1}^{u_0} dy = z_{S1} y \Big|_{u_1}^{u_0} = z_{S1} \sqrt{e^u - u - e^{u_0} + u_0} \Big|_{u_1}^{u_0} =$$

$$= -z_{S1} \sqrt{e^{u_1} - u_1 - e^{u_0} + u_0} = -z_{S1} \sqrt{e^{u_1} \left(1 - e^{-(u_1 - u_0)} \right) - (u_1 - u_0)} =$$

$$\begin{aligned}
&= -z_{S1} \sqrt{e^{u_1} \left(1 - e^{-\Delta u_{10}}\right) - \Delta u_{10}} = \\
&= -z_{S1} \sqrt{-\Delta u_{10} \left(1 - \frac{1}{-\Delta u_{10}} \left(e^{-\Delta u_{10}} - 1\right) e^{u_1}\right)} = \\
&= -z_{S1} \sqrt{-\Delta u_{10} \left(1 - A(-\Delta u_{10}) e^{-u_1}\right)},
\end{aligned}$$

тобто

$$\begin{aligned}
g_{S1} &= -z_{S1} \sqrt{-\Delta u_{10} \left(1 - A(-\Delta u_{10}) e^{u_1}\right)}; \\
A(-\Delta u_{10}) &= \frac{1}{-\Delta u_{10}} \left(e^{-\Delta u_{10}} - 1\right); \tag{3.13}
\end{aligned}$$

$$\Delta u_{10} = u_1 - u_0.$$

Якщо $|\Delta u_{10}| \ll 1$, то:

$$A(\Delta u_{10}) \approx \frac{1}{-\Delta u_{10}} (1 - \Delta u_{10} - 1) = 1$$

та

$$g_{S1} = -z_{S1} \sqrt{-\Delta u_{10} \left(1 - e^{u_1}\right)}.$$

А якщо при цьому і $|u_1| \ll 1$, то:

$$g_{S1} \approx -z_{S1} \sqrt{-\Delta u_{10} (1 - (1 + u_1))} = -z_{S1} \sqrt{-\Delta u_{10}} \sqrt{-u_1} = -z_{S1} \sqrt{\Delta u_{10} u_1}.$$

Аналогічно:

$$\begin{aligned}
g_{S2} &= z_{S2} \frac{1}{2} \int_{u_0}^{u_2} \frac{2ydy}{y} = z_{S2} \int_{u_0}^{u_2} dy = z_{S2} y \Big|_{u_0}^{u_2} = z_{S2} \sqrt{e^u - u - e^{u_0} + u_0} \Big|_{u_0}^{u_2} = \\
&= z_{S2} \sqrt{e^{u_2} - u_2 - e^{u_0} + u_0} = z_{S2} \sqrt{e^{u_2} \left(1 - e^{-(u_2 - u_0)}\right) - (u_2 - u_0)} = \\
&= z_{S2} \sqrt{e^{u_2} \left(1 - e^{-\Delta u_{20}}\right) - \Delta u_{20}} = \\
&= z_{S2} \sqrt{-\Delta u_{20} \left(1 - \frac{1}{-\Delta u_{20}} \left(e^{-\Delta u_{20}} - 1\right) e^{u_2}\right)} = \\
&= z_{S2} \sqrt{-\Delta u_{20} \left(1 - A(-\Delta u_{20}) e^{u_2}\right)},
\end{aligned}$$

тобто

$$\begin{aligned} g_{S2} &= z_{S2} \sqrt{-\Delta u_{20} \left(1 - A(-\Delta u_{20}) e^{u_2} \right)}; \\ A(-\Delta u_{20}) &= \frac{1}{-\Delta u_{20}} \left(e^{-\Delta u_{20}} - 1 \right); \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$\Delta u_{20} = u_2 - u_0.$$

Якщо $|\Delta u_{20}| \ll 1$, то:

$$A(-\Delta u_{20}) \approx \frac{1}{-\Delta u_{20}} (1 - \Delta u_{20} - 1) = 1$$

та

$$g_{S2} \approx -z_{S2} \sqrt{-\Delta u_{20} \left(1 - e^{u_2} \right)}.$$

А якщо при цьому і $|u_2| \ll 1$, то:

$$g_{S2} \approx z_{S2} \sqrt{-\Delta u_{20} (1 - (1 + u_2))} = z_{S1} \sqrt{\Delta u_{20} u_2}.$$

Узагальнюючи отримані результати, знайдемо:

$$\begin{aligned} g_{S1} &= \pm z_{S1} \sqrt{\pm \Delta u_{10} \left(1 - A(\pm \Delta u_{10}) e^{\mp u_1} \right)}; \\ A(\pm \Delta u_{10}) &= \frac{1}{\pm \Delta u_{10}} \left(e^{\pm \Delta u_{10}} - 1 \right); \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\Delta u_{10} = u_1 - u_0.$$

Якщо $|\Delta u_{10}| \ll 1$, то:

$$A(\Delta u_{10}) \approx \frac{1}{\pm \Delta u_{10}} (\pm \Delta u_{10} - 1) = 1 \quad (3.16)$$

та

$$g_{S1} = \pm z_{S1} \sqrt{\pm \Delta u_{10} \left(1 - e^{\mp u_1} \right)}. \quad (3.17)$$

А якщо при цьому і $|u_1| \ll 1$, то:

$$g_{S1} \approx \pm z_{S1} \sqrt{\Delta u_{10} u_1}. \quad (3.18)$$

Аналогічно:

$$g_{S2} = \mp z_{S2} \sqrt{\pm \Delta u_{20} \left(1 - A(\pm \Delta u_{20}) e^{\mp u_2} \right)}; \quad (3.19)$$

$$A(\pm\Delta u_{20}) = \frac{1}{\pm\Delta u_{20}} \left(e^{\pm\Delta u_{20}} - 1 \right);$$

$$\Delta u_{20} = u_2 - u_0.$$

Якщо $|\Delta u_{20}| \ll 1$, то:

$$A(\pm\Delta u_{20}) \approx \frac{1}{\pm\Delta u_{20}} (1 \pm \Delta u_{20} - 1) = 1 \quad (3.20)$$

та

$$g_{S2} \approx \pm z_{S2} \sqrt{\pm\Delta u_{20} \left(1 - e^{\mp u_2} \right)}. \quad (3.21)$$

А якщо при цьому і $|u_2| \ll 1$, то:

$$g_{S2} \approx \mp z_{S1} \sqrt{\Delta u_{20} u_2}. \quad (3.22)$$

Водночас зазначимо, що параметр u_0 у вищенаведених формулах знаходять за формулою (2.6).

Для симетричної задачі співвідношення (3.9) матиме вигляд:

$$\begin{aligned} \delta G &= 1 + \frac{\Delta b_S}{\chi} (g_{S1} + g_{S2}) = \\ &= 1 + (\pm z_{S1} \mp z_{S2}) \frac{\Delta b_S}{\chi} \sqrt{\pm\Delta u_{S0} \left(1 - A(\pm\Delta u_{S0}) e^{\mp u_S} \right)}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

де

$$A(\pm\Delta u_{S0}) = \frac{1}{\pm\Delta u_{S0}} \left(e^{\pm\Delta u_{S0}} - 1 \right);$$

$$\Delta u_{S0} = u_S - u_0.$$

Якщо на обох поверхнях сформовано шари збіднення, то:

$$\pm z_{S1} \mp z_{S2} = \pm z_{S1} (1 - z_{S1} z_{S2}) = \pm 2z_{S1}.$$

Тоді, застосовуючи для симетричної задачі формулу (2.7), отримуємо при $u_0 \neq 0$:

$$\begin{aligned} \delta G &= 1 \pm z_{S1} 2 \frac{\Delta b_S}{\chi} \sqrt{\pm\Delta u_{S0}} \sqrt{1 - A(\pm\Delta u_{S0}) e^{\mp u_S}} = \\ &= 1 \pm z_{S1} 2 \frac{\Delta b_S}{\chi} \sqrt{\mp z_{S1} \left(\frac{\chi}{2} \right)^2} \sqrt{1 - A_\chi \cdot e^{\mp u_S}} = \\ &= 1 \pm z_{S1} 2 \Delta b_S \sqrt{1 - A_\chi \cdot e^{\mp u_S}}, \end{aligned}$$

тобто

$$\delta G = 1 \pm z_{S1} 2\Delta b_S \sqrt{1 - A_\chi \cdot e^{\mp u_s}}; \quad (3.24)$$

$$A_\chi = \mp z_{S1} \left(\frac{2}{\chi} \right)^2 \left(\exp \left(\mp z_{S1} \left(\frac{\chi}{2} \right)^2 \right) - 1 \right) = \mp z_{S1} \frac{4}{\chi^2} \left\{ \exp \left[\mp z_{S1} \frac{\chi^2}{4} \right] - 1 \right\}.$$

Очевидно, якщо $\chi < 1$, то, відповідно до викладеного вище, $A_\chi \approx 1$:

$$\delta G \approx 1 \pm z_{S1} 2\Delta b_S \sqrt{1 - e^{\pm u_s}} \quad (3.25)$$

та

$$\delta G \approx 1 \pm z_{S1} 2\Delta b_S \sqrt{\pm u_s}, \quad (3.26)$$

якщо $|u_s| \ll 1$.

За відсутності заряду на протилежній стороні шару (тобто, якщо $Q_2 = 0$, $u_2 = u_0$) відповідна складова g_{S2} дорівнює нулю, так що результуючу провідність визначають співвідношеннями:

$$\delta G = 1 \pm z_{S1} \frac{\Delta b_S}{\chi} \sqrt{\pm \Delta u_{S0}} \sqrt{1 - A(\pm \Delta u_{S0}) e^{\mp u_s}};$$

$$A(\pm \Delta u_{S0}) = \frac{1}{\pm \Delta u_{S0}} \left(e^{\mp u_{S0}} - 1 \right); \quad (3.27)$$

$$\Delta u_{S0} = u_s - u_0.$$

Якщо на першій поверхні сформовано шар збіднення, то, застосовуючи в даному випадку формулу (2.13)

$$\Delta u_{S0} = u_s - u_0 = -z_{S1} \chi^2,$$

отримаємо:

$$\delta G = 1 \pm z_{S1} \Delta b_S \sqrt{1 - A(\pm \Delta u_{S0}) e^{\mp u_s}}.$$

Очевидно, якщо $\chi < 1$, то, відповідно до викладеного вище, $A_\chi \approx 1$:

$$\delta G \approx 1 \pm z_{S1} 2\Delta b_S \sqrt{1 - e^{\mp u_s}} \quad (3.28)$$

та

$$\delta G \approx 1 \pm z_{S1} 2\Delta b_S \sqrt{\pm u_s}, \quad (3.29)$$

якщо $|u_s| \ll 1$.

Отримаємо тепер аналогічні залежності для малих вигинів зон. Розкладаючи експоненти в ряд та обмежуючись у розкладах членами другого порядку малості, знайдемо:

$$\begin{aligned}\delta G &= 1 \pm z_{S1} \frac{\Delta b_S}{\chi} \left(\sqrt{\frac{u_1^2 - u_0^2}{2}} - z_{S1} z_{S2} \sqrt{\frac{u_1^2 - u_0^2}{2}} \right) = \\ &= 1 \pm z_{S1} \frac{\Delta b_S}{\chi \sqrt{2}} (\sqrt{u_1^2 - u_0^2} - z_{S1} z_{S2} \sqrt{u_1^2 - u_0^2})\end{aligned}\quad (3.30)$$

або:

$$\delta G = 1 + (\pm z_{S1} \mp z_{S2}) \frac{\Delta b_S}{\chi \sqrt{2}} (\sqrt{u_S^2 - u_0^2})\quad (3.31)$$

у випадку симетрії та

$$\delta G = 1 \pm z_{S1} \frac{\Delta b_S}{\chi \sqrt{2}} (\sqrt{u_1^2 - u_0^2}),\quad (3.32)$$

якщо заряд на протилежній стороні шару рівний нулю. З урахуванням співвідношень (2.22)–(2.23):

$$u_S^2 - u_0^2 = th^2 \left(\frac{1}{2} z_{S1} h_{ef} \sqrt{ch(u_B)} \right) \cdot u_S^2\quad (3.33)$$

у випадку симетрії та

$$u_S^2 - u_0^2 = th^2 (z_{S1} h_{ef} \sqrt{ch(u_B)}) \cdot u_S^2,\quad (3.34)$$

якщо заряд на протилежній стороні шару рівний нулю.

А тоді вирази (3. 1) набувають вигляду:

$$\delta G = 1 + (\pm z_{S1} \mp z_{S2}) \frac{\Delta b_S}{\chi \sqrt{2}} \left| th \left(\frac{1}{2} z_{S1} h_{ef} \sqrt{ch(u_B)} \right) \cdot u_S \right|;\quad (3.35)$$

$$\delta G = 1 \pm z_{S1} \frac{\Delta b_S}{\chi \sqrt{2}} \left| th \left(\frac{1}{2} z_{S1} h_{ef} \sqrt{ch(u_B)} \right) \cdot u_S \right|.\quad (3.36)$$

Аналогічно, за малої величини параметра χ , маємо:

$$\delta G = 1 + (\pm z_{S1} \mp z_{S2}) \frac{\Delta b_S}{2} |u_S|;\quad (3.37)$$

$$\delta G = 1 \pm z_{S1} \Delta b_S |u_S|.\quad (3.38)$$

ВИСНОВКИ

Розв'язано одновимірну краєву задачу для рівняння Пуассона у випадку напівпровідника з багатозарядними домішковими центрами. Отримано в явному вигляді перший інтеграл цієї краєвої задачі.

Для найпростіших випадків отримано аналітичні співвідношення, що описують розподіл потенціалу в напівпровідниковій пластині субмікронної товщини.

Отримано аналітичні співвідношення для розрахунку провідності шару напівпровідника субмікронної товщини. Розглянуто напівпровідникові шари обох типів провідності.

ГЛАВА V

АНАЛІЗ СТАТИЧНОЇ ХАРАКТЕРИСТИКИ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СЕНСОРІВ ГАЗУ: ІДЕАЛЬНІ ГАЗИ

РОЗДІЛ 1. ПРОВІДНІСТЬ ПОЛІКРИСТАЛІЧНОЇ СТРУКТУРИ

Якщо у монокристалічних плівок наявні лише поверхні типу міжфазної межі твердого тіла з газовою фазою або з іншим твердим тілом (підкладкою), то для полікристалічних зразків характерний також й інший вид поверхонь — границі між кристалітами (зернами) або мозаїчними блоками [1]. Унаслідок різниці у просторовому розподілі неоднорідностей на цих межах відрізняється і їх вклад в явища переносу зарядів.

Наявність міжзеренних меж, які перпендикулярні напрямку електричного струму, еквівалентне послідовному сполученню їх опорів, тоді як міжфазні границі відповідають паралельному сполученню еквівалентних опорів приповерхневої області та об'єму. А тому еквівалентна електрична схема для полікристалічної плівки на постійному струмі може бути зображена так, як показано на рис. 5.1. Там же показана еквівалентна електрична схема полікристалічної плівки на змінному струмі.

Отже, у першому наближенні для полікристалічної структури в цілому можна записати:

$$G = \left\{ \sum [(\sigma_{S1} + \sigma_{S2} + 2\sigma_{S3} + \sigma_V)^{-1} + \sigma_{gb}^{-1}] \right\}^{-1}, \quad (1)$$

де σ_V — провідність об'ємної фази окремого мікрочастини (тобто такої його області, в якій відсутній вплив поверхонь обох типів);

σ_{S1}, σ_{S2} — провідності приповерхневих шарів мікрочастин на міжфазних межах з підкладкою та з газовою фазою відповідно;

σ_{S3}, σ_{gb} — провідності міжзеренних меж мікрочастин паралельних та перпендикулярних вектору напруженості повздовжнього електричного поля.

Якщо взаємодія з газовою фазою веде до формування на поверхнях мікрочастини збідненого шару, так що досягається нерівність:

$$\sigma_{S1} + \sigma_{S2} + \sigma_{S3} < \sigma_V. \quad (2)$$

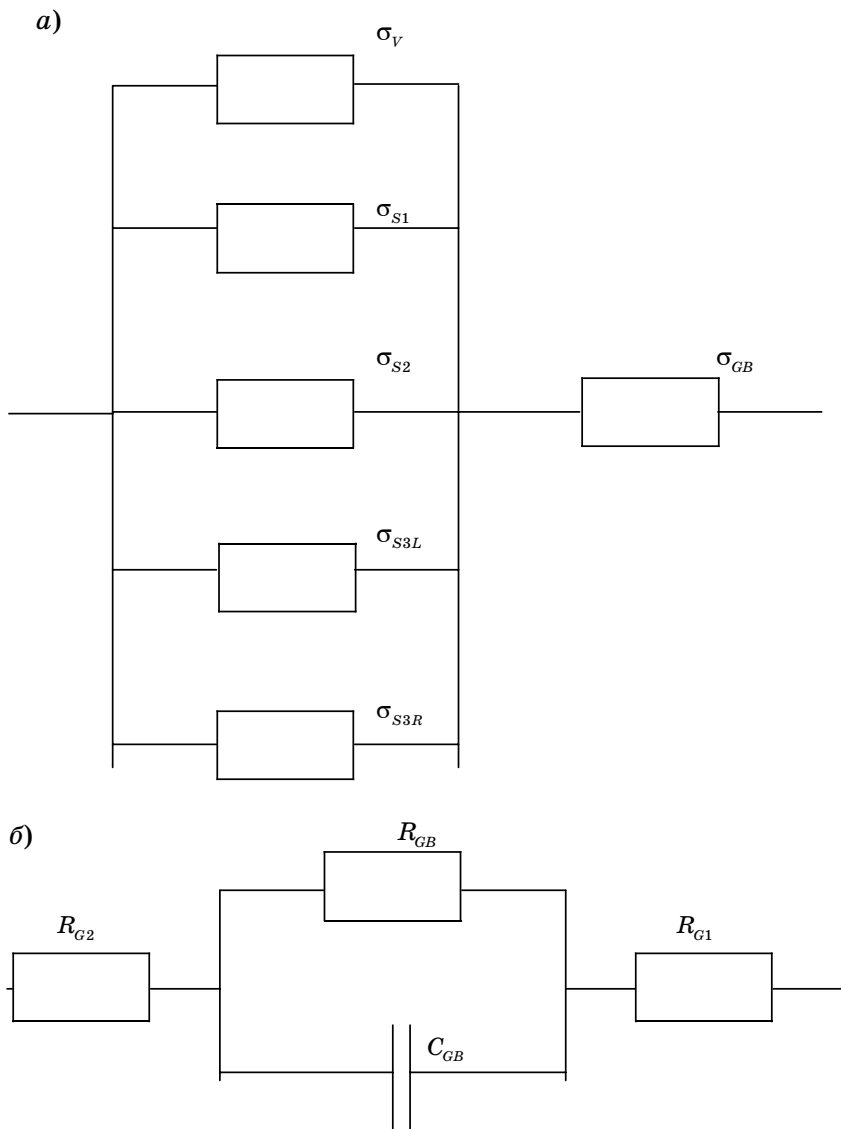


Рис. 5.1. Еквівалентні електричні схеми фрагменту полікристалічної структури на постійному (а) та змінному (б) струмі; GB — індекс межі зерен, \perp ка перпендикулярна до напрямку електричного струму

З рівняння (1) отримаємо:

$$G \approx \left\{ \sum \left[\sigma_V^{-1} + \sigma_{gb}^{-1} \right] \right\}^{-1}, \quad (3)$$

тобто провідність півки визначається співвідношенням провідностей об'ємної фази і ділянок контакту кристалітів, які перпендикулярні вектору напруженості тягнучого електричного поля. При виконанні нерівності $\sigma_{gb} \ll \sigma_V$ домінуючими будуть поверхневі ефекти на ділянках міжкристалітних меж:

$$G \approx \left\{ \sum \sigma_{gb}^{-1} \right\}^{-1}. \quad (4)$$

Якщо в результаті хемосорбції формуються області збагачення, поверхневий бар'єр на міжкристалітних межах може стати прозорим для носіїв заряду. Тобто може бути досягнута нерівність $\sigma_{S1} + \sigma_{S2} + \sigma_{S3} > \sigma_V$, так що результуюча провідність визначатиметься залежністю:

$$G \approx \left\{ \sum \sigma_V^{-1} \right\}^{-1} \quad (5.a)$$

чи:

$$G \approx \left\{ \sum (\sigma_{S1} + \sigma_{S2} + 2\sigma_{S3} + \sigma_V)^{-1} \right\}^{-1}, \quad (5.b)$$

якщо $\sigma_{gb} \gg \sigma_V$, або

$$G = \left\{ \sum [(\sigma_{S1} + \sigma_{S2} + 2\sigma_{S3})^{-1} + \sigma_{gb}^{-1}] \right\}^{-1}, \quad (5.c)$$

якщо $\sigma_{S1} + \sigma_{S2} + \sigma_{S3} \gg \sigma_V$.

Провідності 1,2,3 можна розрахувати на основі співвідношень для монокристалічного шару. Що ж стосується компоненти σ_{gb} , то вона визначається висотою потенціального бар'єра на межі зерен і розраховується залежно від механізму переносу носіїв заряду через ділянку міжкристалітної межі (див. рис. 5.2). Якщо домінуючим механізмом є термоелектронна емісія над потенціальним бар'єром, то можна застосувати модель Петріца. Згідно з його підходом у цьому випадку має місце співвідношення:

$$\sigma \sim \exp(-E_\sigma/kT), \quad (6)$$

де E_σ — енергія активації провідності, причому

$$E_\sigma \approx E_{n(p)} + qV_s E_\sigma, \quad (7)$$

де E_n і E_p — енергії активації носіїв струму для n - і p -типу напівпровідників;

qV_s — висота потенціального бар'єра.

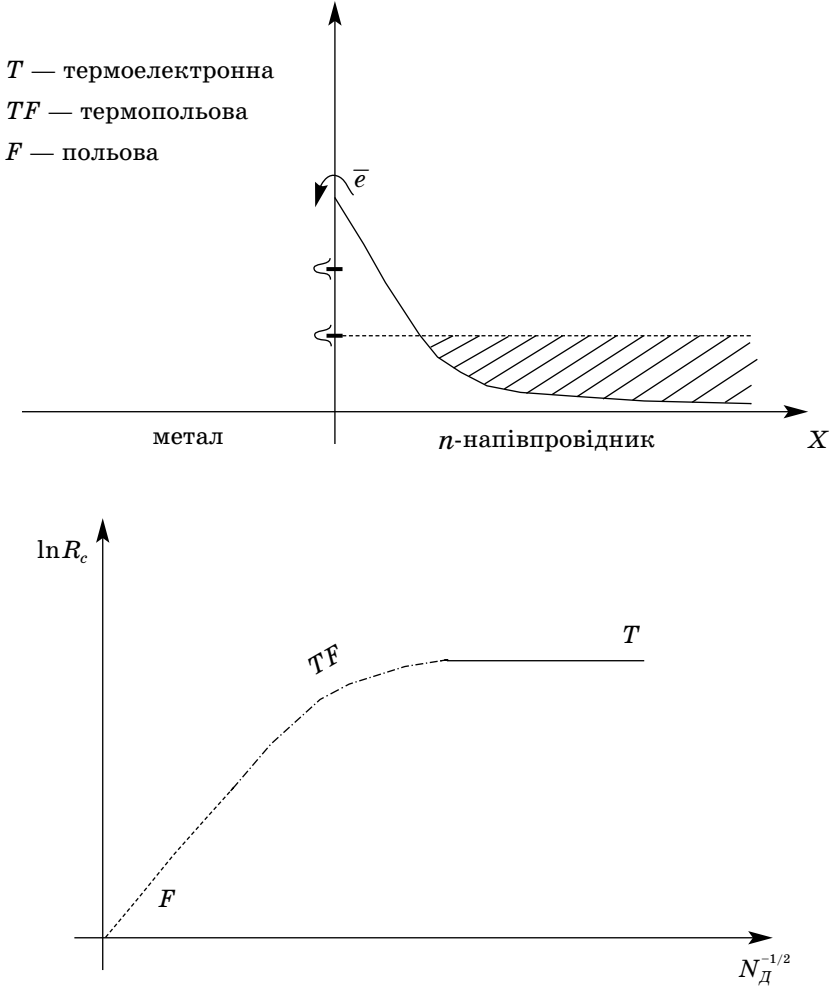


Рис. 5.2. Основні типи переносу заряду (емісії електронів) через бар'єр Шоттки та їх залежність від концентрації донорів згідно із Дж. Поуст [1.20]

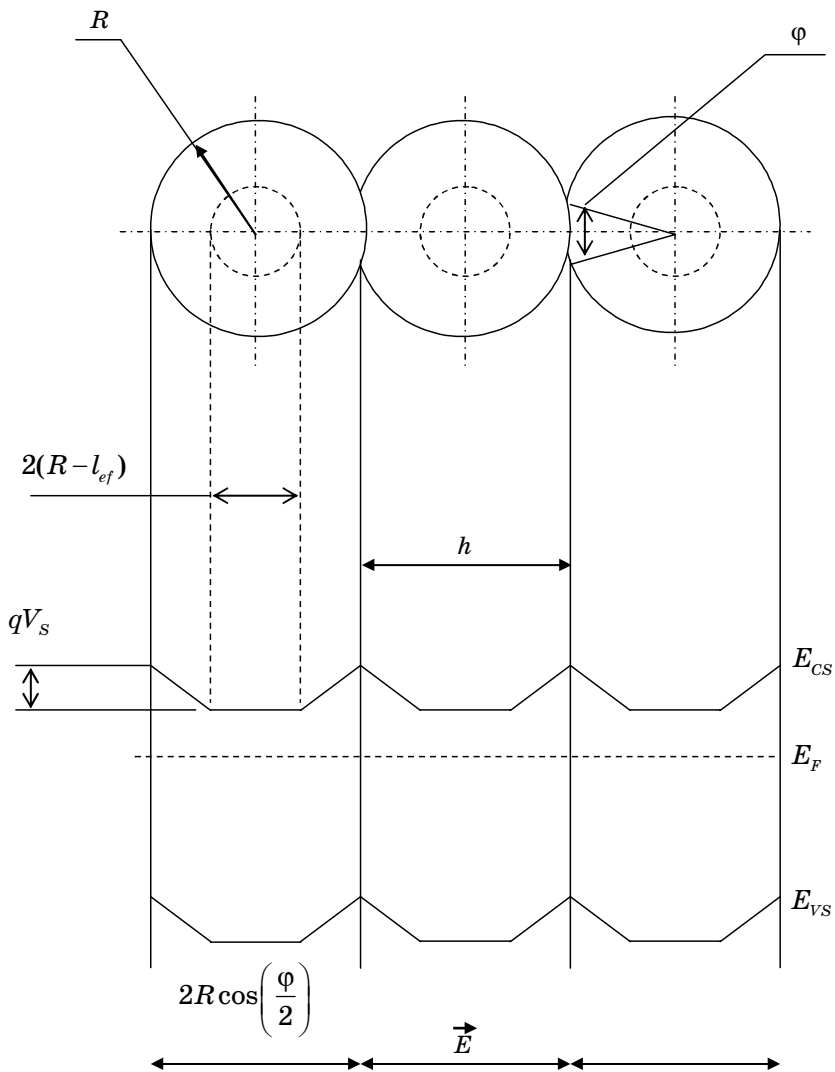


Рис. 5.3. Апроксимуюча реальну структуру сферичними зернами модель та відповідна енергетична діаграма

Для цілей нашого аналізу більш зручно представити співвідношення (6) у формі, яку звичайно застосовують у фізичній хімії для пресованих порошків [2]:

$$\sigma_n = \sigma_{0n} \exp\left(-\frac{E_c + qV_S - E_F}{kT}\right) = \sigma_{0n} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \cdot \lambda^{-1} \exp(-u_s) \quad (8)$$

у випадку напівпровідника *n*-типу, та

$$\sigma_p = \sigma_{0p} \exp\left(-\frac{E_F - (E_V + qV_S)}{kT}\right) = \sigma_{0p} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right) \cdot \lambda \cdot \exp(u_s) \quad (9)$$

у випадку напівпровідника *p*-типу провідності. Тут $\sigma_{0n(p)}$ — передекспоненціальний множник, який залежить від типу матеріалу ЧЕ, площі контактів між зернами та розміру самих зерен. Вираз (8), наприклад, для моделі апроксимуючої сфери (див. рис. 5.3) можна записати так:

$$G = G_0 \pi R^2 \sin^2(\varphi/2) \lambda^{-1} e^{-u_s}, \quad (10)$$

а для моделі апроксимуючого циліндра:

$$G = G_0 2Rt \sin(\varphi/2) \lambda^{-1} e^{-u_s}. \quad (11)$$

Таким чином, провідність полікристалічної плівки під час її взаємодії з ГФ визначається у випадку збіднюючого вигину зон, висотою міжкристалітного бар'єра, рівнем легування і розмірами як зерен, так і площі контакту між зернами. Остання обставина іноді є особливо істотною, оскільки в ряді випадків [1.12] відбувається зміна розмірів кристалітів та площі контакту між ними як у процесі вимірювання, так і в процесі експлуатації ЧЕ.

РОЗДІЛ 2. ІЗОТЕРМИ ХЕМОСОРБЦІЇ АКТИВНИХ ГАЗІВ НА ПОВЕРХНІ НАПІВПРОВІДНИКА

У статичному режимі рівняння для першої стадії хемосорбції ідеального газу записуємо у вигляді [1]:

$$k_{\alpha}^A \left(N^* - \sum_{k=1}^w \sum_{j=n_k}^{n_k^+} N_{kj} - \sum_{k=w+1}^{w^*} N_k \right) \cdot p_{\alpha} - k_{\alpha}^D N_{\alpha 0} = 0, \quad (1)$$

де N^* — загальна кількість адсорбційних центрів;

w^* — загальне число сортів поверхневих електронних станів;

w — кількість сортів активних газів, які хемосорбуються на поверхні адсорбента;

p_α — парціальний тиск молекул газу α -сорту;

N_{kj} — число одиниць поверхневих станів k -сорту в j -му зарядовому стані;

k_α^A, k_α^D — константи адсорбції та десорбції газу α -сорту, причому:

$$k_\alpha^A = \frac{f_\alpha}{\sqrt{2\pi m_\alpha k T_g}}; k_\alpha^D = \frac{1}{\tau_\alpha}; \tau_\alpha = \tau_0 \exp\left(\frac{Q_\alpha^A}{RT}\right), \quad (2)$$

де f_α — коефіцієнт акомодатії часток α -газу;

m_α — маса молекули газу α -сорту;

Q_α^A — теплота десорбції;

τ_0 — мінімальний час перебування молекули в адсорбованому стані.

Згідно з узагальненою статистикою Фермі — Дірака для поверхневих станів мають місце наступні співвідношення:

$$N_\alpha = D_\alpha N_{\alpha 0} \quad (3)$$

та

$$\xi_\alpha^{XC} = SD_\alpha \cdot N_\alpha, \quad (4)$$

де $N_{\alpha 0}$ — доля часток ідеального газу α -сорту, що знаходяться на поверхні в електрично нейтральному стані;

ξ_α^{XC} — вклад у поверхневий заряд хемосорбційного походження часток ідеального газу α -сорту;

SD_α, D_α — многочлени, вид яких описано в розділі 2 глави III (формули (54)–(57)).

Враховуючи сказане, рівняння (1) можна переписати так:

$$N^* - \sum_{k \neq \alpha} \sum_{j=n_k}^{n_k^+} N_{kj} = D_\alpha N_{\alpha 0} + \frac{N_{\alpha 0}}{b_\alpha p_\alpha}, \quad (5)$$

де

$$b_\alpha = \frac{k_\alpha^A}{k_\alpha^D}. \quad (6)$$

А тоді

$$\left(N^* - \sum_{k \neq \alpha}^w D_k N_{k0} - \sum_{k=w+1}^{w^*} N_k \right) b_\alpha p_\alpha = b_\alpha p_\alpha D_\alpha N_{\alpha 0} + N_{\alpha 0}$$

та

$$(b_{\alpha} p_{\alpha} D_{\alpha} + 1) N_{\alpha 0} + b_{\alpha} p_{\alpha} \sum_{k \neq \alpha}^w D_k N_{k0} = N^* b_{\alpha} p_{\alpha} \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k \right),$$

або:

$$(b_{\alpha} p_{\alpha} D_{\alpha} + 1) \theta_{\alpha 0} + b_{\alpha} p_{\alpha} \sum_{k \neq \alpha}^w D_k \theta_{k0} = b_{\alpha} p_{\alpha} \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k \right); \quad (7)$$

$$\theta_{k0} = \frac{N_{k0}}{N^*},$$

де θ_{k0} — доля поверхні, що зайнята частками k -сорту в нейтральному зарядовому стані;

w — загальне число сортів поверхневих електронних станів;

N^* — поверхнева густина адсорбційних центрів.

У розглядуваному випадку хемосорбції спектра w активних газів за присутності w^* — w нелетючих поверхневих добавок рівність (7) породжує систему рівнянь:

$$\begin{aligned} & (c_1 D_1 + 1) \theta_{210} + c_1 D_2 \theta_{20} + c_1 D_3 \theta_{30} + \dots = \\ & = c_1 D_{\alpha} \theta_{\alpha 0} + \dots + c_1 D_w \theta_{w0} = c_1 \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k \right); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & c_2 D_1 \theta_{10} + (c_2 D_2 + 1) \theta_{20} + c_2 D_3 \theta_{30} + \dots = \\ & = c_2 D_{\alpha} \theta_{\alpha 0} + \dots + c_2 D_w \theta_{w0} = c_2 \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k \right); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & c_3 D_1 \theta_{10} + c_3 D_2 \theta_{20} + (c_3 D_3 + 1) \theta_{30} + \dots = \\ & = c_3 D_{\alpha} \theta_{\alpha 0} + \dots + c_3 D_w \theta_{w0} = c_3 \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k \right); \end{aligned}$$

...

$$\begin{aligned} & c_{\alpha} D_1 \theta_{10} + c_{\alpha} D_2 \theta_{20} + c_{\alpha} D_3 \theta_{30} + \dots = \\ & = (c_{\alpha} D_{\alpha} + 1) \theta_{\alpha 0} + \dots + c_{\alpha} D_w \theta_{w0} = c_{\alpha} \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k \right); \end{aligned}$$

...

$$\begin{aligned} & c_w D_1 \theta_{10} + c_w D_2 \theta_{20} + c_w D_3 \theta_{30} + \dots = \\ & = c_w D_{\alpha} \theta_{\alpha 0} + \dots + (c_w D_w + 1) \theta_{w0} = c_w \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k \right). \end{aligned}$$

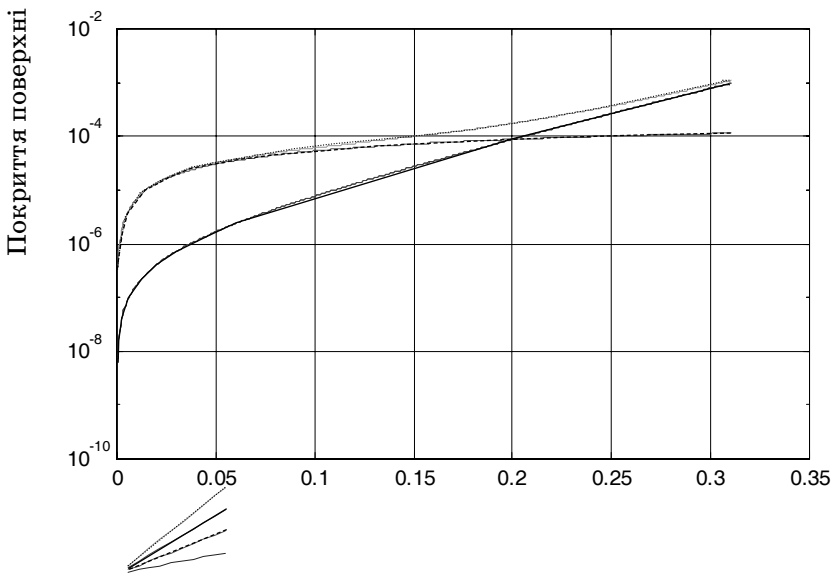


Рис. 5.4, а. Залежність покриття поверхні діоксида олова нейтральною та однократно іонізованою фракціями акцепторного адсорбату від величини поверхневого потенціалу.

$$E_f - E_i = 1,2 \text{ eV}; E_a - E_i = 1,0 \text{ eV}; T = 600 \text{ K}$$

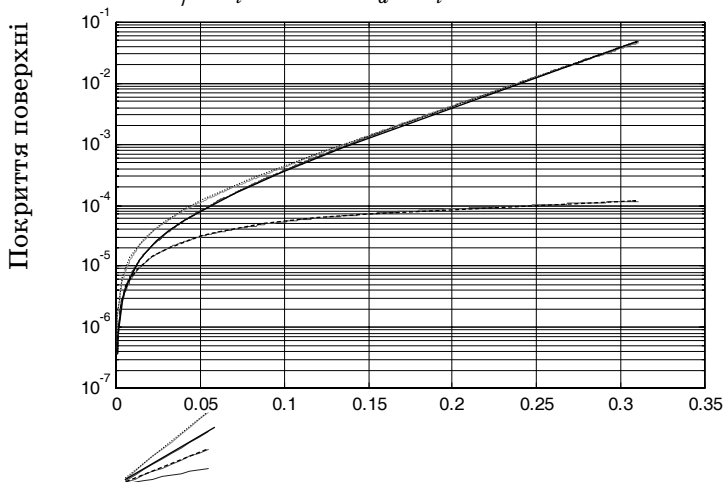


Рис. 5.4, б. Залежність покриття поверхні діоксида олова нейтральною та однократно іонізованою фракціями акцепторного адсорбату від величини поверхневого потенціалу.

$$E_f - E_i = 1,2 \text{ eV}; E_a - E_i = 1,2 \text{ eV}; T = 600 \text{ K}$$

Це лінійна система рівнянь виду $Ax = C^*$,

де

$$\begin{aligned}x_i &= \theta_{i0}, \quad c_i = b_i p_i; \\c_i^* &= b_i p_i \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k\right) = c_i \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k\right); \\a_{ij} &= b_i p_i D_j = c_i D_j; \\a_{ij} &= b_i p_i D_j + 1 = c_i D_j + 1.\end{aligned}$$

Її розв'язок:

$$\theta_{\alpha 0} = \frac{b_\alpha p_\alpha}{1 + \sum_{k=1}^w D_k b_k p_k} \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k\right) = \frac{1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k}{1 + \sum_{k=1}^w D_k b_k p_k} b_\alpha p_\alpha \quad (8.a)$$

або:

$$\theta_\alpha = \frac{D_\alpha b_\alpha p_\alpha}{1 + \sum_{k=1}^w D_k b_k p_k} \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k\right) = \frac{1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k}{1 + \sum_{k=1}^w D_k b_k p_k} D_\alpha b_\alpha p_\alpha. \quad (8.b)$$

Проілюструємо сказане на прикладі системи другого порядку:

$$\begin{aligned}(b_1 p_1 D_1 + 1)\theta_{10} + b_1 p_1 D_2 \theta_{20} &= b_1 p_1 (1 - \theta_1 - \theta_2); \\b_2 p_2 D_1 \theta_{10} + (b_2 p_2 D_2 + 1)\theta_{20} &= b_2 p_2 (1 - \theta_1 - \theta_2),\end{aligned}$$

для якої:

$$\begin{aligned}c_1 &= b_1 p_1; \\c_2 &= b_2 p_2; \\c_1^* &= c_1(1 - \theta_1 - \theta_2); \\c_2^* &= c_2(1 - \theta_1 - \theta_2); \\a_{11} &= b_1 p_1 D_1 + 1 = c_1 D_1 + 1; \quad a_{22} = b_2 p_2 D_2 + 1 = c_2 D_2 + 1; \\a_{12} &= b_1 p_1 D_2 + 1 = c_1 D_2; \quad a_{21} = b_2 p_2 D_1 + 1 = c_2 D_1.\end{aligned}$$

Знайдемо визначники:

$$\begin{aligned}\Delta &= a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12} = (c_1 D_1 + 1)(c_2 D_2 + 1) - c_2 D_1 c_1 D_2 = \\&= c_1 D_1 c_2 D_2 + c_2 D_2 + c_1 D_1 + 1 - c_2 D_1 c_1 D_2 = \\&= 1 + c_1 D_1 + c_2 D_2 = 1 + b_1 p_1 D_1 + b_2 p_2 D_2;\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Delta_1 &= c_1^* a_{22} - c_2^* a_{12} = c_1^* (c_2 D_2 + 1) - c_2^* c_1 D_2 = \\
&= c_1^* c_2 D_2 + c_1^* - c_2^* c_1 D_2 = c_1^* = b_1 p_1 (1 - \theta_1 - \theta_2); \\
\Delta_2 &= a_{11} c_2^* - a_{21} c_1^* = (c_1 D_1 + 1) c_2^* - c_2 D_1 c_1^* = \\
&= c_2^* c_1 D_1 + c_2^* - c_2 D_1 c_1^* = c_2^* = b_2 p_2 (1 - \theta_1 - \theta_2).
\end{aligned}$$

Застосуємо формули Крамера:

$$\begin{aligned}
\theta_{10} &= \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{b_1 p_1 (1 - \theta_1 - \theta_2)}{1 + b_1 p_1 D_1 + b_2 p_2 D_2}; \\
\theta_{20} &= \frac{\Delta_2}{\Delta} = \frac{b_2 p_2 (1 - \theta_1 - \theta_2)}{1 + b_1 p_1 D_1 + b_2 p_2 D_2}.
\end{aligned}$$

Отже, формули (8) коректні.

А тоді відповідний вклад у поверхневий заряд:

$$\begin{aligned}
\xi_{\alpha}^{XC} &= SD_{\alpha} N^* \theta_{\alpha} = SD_{\alpha} N^* \frac{D_{\alpha} b_{\alpha} p_{\alpha}}{1 + \sum_{k=1}^w D_k b_k p_k} \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k \right) = \\
&= N^* \frac{S_{\alpha} b_{\alpha} p_{\alpha}}{1 + \sum_{k=1}^w D_k b_k p_k} \left(1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k \right) = N^* \frac{1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k}{1 + \sum_{k=1}^w D_k b_k p_k} S_{\alpha} b_{\alpha} p_{\alpha}.
\end{aligned} \tag{9}$$

Повний вклад адсорбованих часток у поверхневий заряд:

$$\begin{aligned}
N_t^{XC} &= N^* \cdot \sum_{\alpha=1}^w \xi_{\alpha}^{XC} = \sum_{\alpha=1}^w SD_{\alpha} N_{\alpha} = \\
&= N^* \cdot \frac{1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k}{1 + \sum_{k=1}^w D_k b_k p_k} \sum_{\alpha=1}^w S_{\alpha} b_{\alpha} p_{\alpha},
\end{aligned} \tag{10}$$

так що сумарний поверхневий заряд дорівнює:

$$N_t = N_t^{XC} + \sum_{k=w+1}^{w^*} SD_k N_k = N^* \left(\theta_t^{XC} + \sum_{k=w+1}^{w^*} SD_k \theta_k \right). \tag{11}$$

Отже, у рамках класичних постулатів теорії Ленгмюра для адсорбції газів та електронної теорії хемосорбції газів на поверхні напівпровідника і з застосуванням узагальненої статистики Фермі — Дірака для поверхневих електронних станів отримано аналітичні вирази для розрахунку ізотерм хемосорбції

активних газів (8) та поверхневого заряду хемосорбційного по-
ходження (9)–(11).

РОЗДІЛ 3. ЧУТЛИВІСТЬ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СЕНСОРІВ

Статична характеристика чутливого елемента напівпровідни-
кового сенсора газу визначається, у першу чергу, значенням по-
тенціального бар'єра, який знаходять із системи рівнянь [2] виду:

$$\begin{aligned} \rho(c_r, u_B) &= 0; \\ \Phi(p, u_S, u_B) &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

де

$$\begin{aligned} \Phi(p, u_S, u_B) &= N_t^{XC}(p, u_S, u_B) + \\ &+ N_t^B(u_S, u_B) + N_{SC}(u_S, u_B); \end{aligned} \quad (2)$$

$$N_t^{XC} = N^* \cdot \frac{1 - \sum_{k=w+1}^{w^*} \theta_k}{1 + \sum_{k=1}^w D_k b_k P_k} \sum_{\alpha=1}^w S_\alpha b_\alpha P_\alpha; \quad (3)$$

$$N_t^B = \sum_{k=w+1}^{w^*} SD_k N_k = N^* \sum_{k=w+1}^{w^*} SD_k \theta_k; \quad (4)$$

$$N_{SC}(u_S, u_B) = z_S F_{0N} \cdot F(u_B, u_S); \quad (5)$$

$$\rho(u_B) = p(u_B) - n(u_B) + \sum_{r=1}^v c_r \cdot SD_r(u_B). \quad (6)$$

Очевидно, чутливість напівпровідникового сенсора до варіа-
цій парціального тиску вимірюваного газу визначається похід-
ною від потенціального бар'єра за величиною парціального тис-
ку відповідної компоненти з газової суміші.

Якщо знехтувати варіаціями рівня Фермі у процесі вимірю-
вання (що має місце за невисоких температур або може бути за-
безпечено технологічними заходами) і взяти до уваги лише перше
з рівнянь системи, то, застосовуючи правило диференціювання
заданої неявно функції, матимемо:

$$\frac{\partial u_S}{\partial p_k} = - \frac{\partial \Phi(p, u_S, u_B)}{\partial p_k} / \frac{\partial \Phi(p, u_S, u_B)}{\partial u_S}. \quad (7)$$

Визначимо відповідні компоненти. Похідна від $\Phi(p, u_S, u_B)$
за парціальним тиском вимірюваного k -го газу має вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi(p, u_S, u_B)}{\partial p_k} &= \frac{\partial N_t^{XC}(p, u_S, u_B)}{\partial p_k} = \\ &= N^* \left(1 - \sum_{\alpha=w+1}^{w^*} \theta_\alpha \right) \cdot \frac{S_k b_k \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_k b_k \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha}{\left(1 + \sum_{\alpha=1}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right)^2}; \quad (8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi(u_S, u_B)}{\partial p_k} &= \frac{\partial Q_{ss}^{XC}(u_S, u_B)}{\partial p_k} = \\ &= qN^* \sum_{\alpha=1}^{w_1} \left\{ SD_\alpha(u_S) \frac{\partial \left\{ \left[1 - \sum_{\ell \neq \alpha}^w \theta_\ell \right] / \left[1 + (D_\alpha(u_S) b_\alpha p_\alpha)^{-1} \right] \right\}}{\partial p_k} \right\} = \\ &= qN^* SD_k(u_S) \left[\left(1 - \sum_{\ell \neq k}^w \theta_\ell \right) D_k(u_S) b_k \right] \left[1 + (D_k(u_S) b_k p_k)^{-1} \right]^{-2}. \end{aligned}$$

Дійсно,

$$\frac{\partial}{\partial p_k} \left(\frac{\sum_{\alpha=1}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha}{1 + \sum_{j=1}^w D_j b_j p_j} \right) = \frac{S_k b_k \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_k b_k \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha}{\left(1 + \sum_{\alpha=1}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right)^2},$$

оскільки чисельник дорівнює

$$\begin{aligned} &S_k b_k + S_k b_k \cdot D_k b_k p_k + S_k b_k \cdot \sum_{j \neq k}^w D_j b_j p_j - D_k b_k \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha - \\ &- D_k b_k \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha = S_k b_k + S_k b_k \cdot \sum_{j \neq k}^w D_j b_j p_j - D_k b_k \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha. \end{aligned}$$

Похідна від $\Phi(p, u_S, u_B)$ за поверхневим потенціалом у загальному випадку складається із трьох компонент:

$$\frac{\partial \Phi(p, u_S, u_B)}{\partial u_S};$$

$$\frac{\partial \Phi(p, u_S, u_B)}{\partial u_S} = \frac{\partial}{\partial u_S} N_t^{XC}(p, u_S, u_B) + \frac{\partial}{\partial u_S} N_t^B(u_S, u_B) + \frac{\partial}{\partial u_S} N_{SC}(u_S, u_B).$$

Знайдемо кожну з цих складових. Похідну від хемосорбційної складової поверхневого заряду у випадку хемосорбції простого активного газу визначають співвідношенням:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_S} N_t^{XC}(p, u_S, u_B) = N^* \left(1 - \sum_{\alpha=w+1}^{w^*} \theta_\alpha \right) \times \\ \times \frac{\sum_{\alpha=1}^w \left(\frac{\partial S_\alpha}{\partial u_S} b_\alpha p_\alpha \right) + \left(\sum_{j=1}^w b_j p_j \right) \cdot \sum_{\alpha=1}^w \left(\frac{\partial S_\alpha}{\partial u_S} b_\alpha p_\alpha \right)}{\left(1 + \sum_{j=1}^w D_j b_j p_j \right)^2}. \end{aligned} \quad (9)$$

Дійсно, тут:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_S} \left(\frac{\sum_{\alpha=1}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha}{1 + \sum_{j=1}^w D_j b_j p_j} \right) = \\ = \frac{\sum_{\alpha=1}^w \left(\frac{\partial S_\alpha}{\partial u_S} b_\alpha p_\alpha \right) + \left(\sum_{j=1}^w b_j p_j \right) \cdot \sum_{\alpha=1}^w \left(\frac{\partial S_\alpha}{\partial u_S} b_\alpha p_\alpha \right)}{\left(1 + \sum_{j=1}^w D_j b_j p_j \right)^2}. \end{aligned}$$

Останнє рівняння має місце згідно з теоремою 5.3.2:

$$S'(u_S) = \frac{\partial S_\alpha(u_S)}{\partial u_S} = \sum_{j=n_\alpha^-}^{n_\alpha^+} j^2 H_{\alpha j}(u_S).$$

Похідна від біографічної компоненти поверхневого заряду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_S} N_t^B(u_S, u_B) = N^* \sum_{\alpha=w+1}^{w^*} \theta_\alpha \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - (SD_\alpha)^2 \right) = \\ = \sum_{\alpha=w+1}^{w^*} N_\alpha \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - (SD_\alpha)^2 \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Дійсно,

$$\begin{aligned} N^* \frac{\partial}{\partial u_S} \sum_{\alpha=w+1}^{w^*} SD_\alpha \theta_\alpha = N^* \sum_{\alpha=w+1}^{w^*} \frac{\partial}{\partial u_S} SD_\alpha \theta_\alpha = \\ = N^* \sum_{\alpha=w+1}^{w^*} \theta_\alpha \left(\frac{S'_\alpha}{D_\alpha} - (SD_\alpha)^2 \right) \end{aligned}$$

згідно з теоремою 5.3.3.

Похідна від компоненти заряду, акумульованого в ОПЗ:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_S} N_{SC}(u_S, u_B) &= z_S F_{0N} \cdot \frac{\partial}{\partial u_S} F(u_B, u_S) = \\ &= z_S F_{0N} \cdot \frac{-2sh(u_B - u_S) + \sum_{r=1}^v c_r \cdot SD_r(u_S, u_B)}{2F(u_B, u_S)}. \end{aligned} \quad (11)$$

Дійсно,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial u_S} F(u_B, u_S) &= \frac{\partial \xi(u_B, u_S)}{\partial u_S} / 2F(u_B, u_S); \\ \frac{\partial \xi(u_S, u_B)}{\partial u_S} &= -2sh(u_B - u_S) + \sum_{r=1}^v \frac{\partial}{\partial u_S} J_r(u_S, u_B); \\ \frac{\partial}{\partial u_S} J_r(u_S, u_B) &= \frac{c_r \cdot \sum_{\ell=n_r^-}^{n_r^+} l \cdot \exp(lu_S) f_{r\ell}(u_B)}{\sum_{\ell=n_r^-}^{n_r^+} \exp(lu_S) f_{r\ell}(u_B)} = \\ &= c_r \cdot \frac{S_r(u_S, u_B)}{D_r(u_B)} / \frac{D_r(u_S, u_B)}{D_r(u_B)} = c_r \cdot SD_r(u_S, u_B). \end{aligned}$$

Отже, на основі отриманих співвідношень можна розрахувати шукану чутливість поверхневого потенціального бар'єра за парціальним тиском вимірюваного газу за формулою:

$$\frac{\partial u_S}{\partial p_k} = \frac{\frac{\partial}{\partial p_k} Q_{ss}^{XC}(u_S, u_B)}{\frac{\partial}{\partial u_S} Q_{ss}^{XC}(u_S, u_B) + \frac{\partial}{\partial u_S} Q_{ss}^B(u_S, u_B) + \frac{\partial}{\partial u_S} Q_{sc}(u_S, u_B)}, \quad (12)$$

де всі компоненти визначені нами вище.

РОЗДІЛ 4. СЕЛЕКТИВНІСТЬ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СЕНСОРІВ ГАЗУ

Визначимо селективність [3] як відношення різниці чутливостей сенсора по вимірюваному газу та суми чутливостей усіх інших газів газової суміші до чутливості сенсора по вимірюваному газу:

$$K_k = \frac{S_k - \sum_{l \neq k}^{w_l} S_l}{S_k}, \quad (1)$$

тобто

$$K_k = 1 - \frac{\sum_{l \neq k}^{w_l} S_l}{S_k} = 1 - \sum_{l \neq k} \frac{w_l S_l}{S_k}, \quad (2)$$

де S_l — чутливість поверхневого потенціалу до варіацій парціального тиску l -компоненти досліджуваного газового середовища:

$$S_l = \frac{\partial u_S}{\partial p_l},$$

w_1 — загальна кількість активних газових компонент в атмосфері. За означенням [8] похідної неявно заданої функції:

$$S_k = \frac{\partial u_S}{\partial p_k} = - \left\{ \frac{\partial \phi(u_S, u_B)}{\partial p_k} \div \frac{\partial \phi(u_S, u_B)}{\partial u_S} \right\} \quad (3)$$

та

$$S_l = \frac{\partial u_S}{\partial p_l} = - \left\{ \frac{\partial \phi(u_S, u_B)}{\partial p_l} \div \frac{\partial \phi(u_S, u_B)}{\partial u_S} \right\}. \quad (4)$$

А тоді:

$$\begin{aligned} \frac{S_l}{S_k} &= \left(\frac{\partial u_S}{\partial p_l} \bigg/ \frac{\partial u_S}{\partial p_k} \right) = \\ &= \left\{ \frac{\partial \phi(u_S, u_B)}{\partial p_l} \div \frac{\partial \phi(u_S, u_B)}{\partial p_k} \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Як показано у попередньому параграфі, відповідні похідні від функціоналу $\phi(u_S, u_B)$ за парціальним тиском компонент газової суміші p_l можна дати залежністю:

$$\frac{\partial \Phi(p, u_S, u_B)}{\partial p_l} = \frac{\partial N_t^{XC}(p, u_S, u_B)}{\partial p_l} = N^* \left(1 - \sum_{\alpha=w+1}^{w^*} \theta_\alpha \right) \times$$

$$S_l b_l \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_l b_l \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha$$

$$\times \frac{1}{\left(1 + \sum_{\alpha=1}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right)^2}, \quad (6)$$

а за парціальним тиском k -компоненти p_k залежністю:

$$\frac{\partial \Phi(p, u_S, u_B)}{\partial p_k} = \frac{\partial N_t^{XC}(p, u_S, u_B)}{\partial p_k} = N^* \left(1 - \sum_{\alpha=w+1}^{w^*} \theta_\alpha \right) \times$$

$$S_k b_k \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_k b_k \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha$$

$$\times \frac{1}{\left(1 + \sum_{\alpha=1}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right)^2}. \quad (7)$$

А тоді:

$$\frac{S_l}{S_k} = \left(\frac{\partial u_S}{\partial p_l} / \frac{\partial u_S}{\partial p_k} \right) = \frac{S_l b_l \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_l b_l \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha}{S_k b_k \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_k b_k \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha} \quad (8)$$

та

$$K_k = \frac{S_k - \sum_{l \neq k}^{w_1} S_l}{S_k} = 1 - \sum_{l \neq k}^{w_1} \frac{S_l}{S_k} =$$

$$= 1 - \sum_{l \neq k}^{w_1} \frac{S_l b_l \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_l b_l \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha}{S_k b_k \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_k b_k \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha} = \quad (9)$$

$$= 1 - \frac{\sum_{l \neq k}^{w_1} S_l b_l \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_l b_l \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha}{S_k b_k \cdot \left(1 + \sum_{\alpha \neq k}^w D_\alpha b_\alpha p_\alpha \right) - D_k b_k \cdot \sum_{\alpha \neq k}^w S_\alpha b_\alpha p_\alpha}.$$

ВИСНОВКИ

Виконано аналіз статичної характеристики напівпровідникового сенсора газу. Отримано ізотерми хемосорбції активних газів на поверхні напівпровідникового матеріалу.

Досліджено чутливість напівпровідникового сенсора та отримано відповідні співвідношення.

Дано означення селективності та знайдено аналітичні співвідношення для розрахунку чутливості та селективності напівпровідникового сенсора.

ГЛАВА VI

МЕТОДИКИ РОЗРАХУНКУ ОСНОВНИХ ЕЛЕКТРОФІЗИЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК МАТЕРІАЛУ ЧУТЛИВОГО ЕЛЕМЕНТУ

РОЗДІЛ 1. ОРГАНІЗАЦІЯ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОГО ЕКСПЕРИМЕНТУ

У цьому розділі розглянемо питання проведення обчислювального експерименту в межах розробленого відповідно до результатів даної роботи програмного забезпечення, оформленого у вигляді пакета прикладних програм «Мікрон», який реалізовано на алгоритмічних мовах Fortran та C++.

«Глобальна» організація обчислень (див. рис. 6.1) виконується головним модулем за допомогою буферної підпрограми TABUL та групи сервісних програм WAR, PECH, ARGUM, WYVOD, RDAN і передбачає формування вихідного масиву для побудови графіків стандартного типу — функцій одного аргументу при кількох рівнях варійованої змінної. Головний модуль має просту структуру та забезпечує: 1) введення даних детально для конкретного експерименту з файлів ELFIZ.DAT (характеристики матеріалу) та FZXIM.DAT (характеристики поверхневої та квазіхімічної об'ємної реакції); 2) читання у циклі підпрограми RDAN глобальних для підзадачі змінних (аргумент і варійована змінна, їх імена тощо та виклик буферної підпрограми TABUL.

Вихідним щодо головної програми параметром підпрограми RDAN є ідентифікатор IER. Якщо $IER = 1$, то зчитуються з файлу VARG.DAT дані чергової задачі, а якщо $IER = 9$, то програма обчислювального експерименту завершена, і про це повідомляють оператора — «кінець обчислень».

Таким чином, функцію формування масиву виконує саме підпрограма TABUL, яка в цій ланці єдина, що не є незмінною. Вона пишеться під конкретний експеримент, хоча й має постійну «ідейну» структуру. Організація обчислень для конкретної підзадачі (модуль SHCET) виконана за допомогою сервісних підпрограм ARGUM та PECH (див. рис. 6.2). Підпрограма START тут забезпечує введення допоміжних даних із файлу TEST.DAT, виконання необхідних для роботи підпрограм наступних підзадач обчислень і завантаження їх у COMMON-блоки.

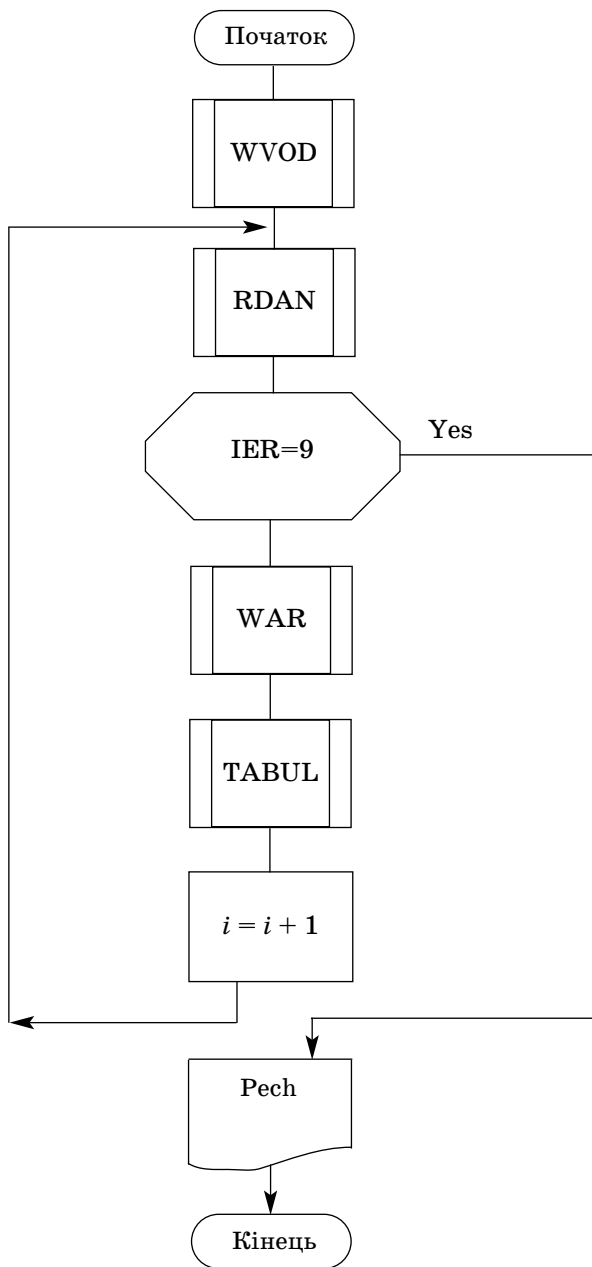


Рис. 6.1. Блок-схема головного модуля

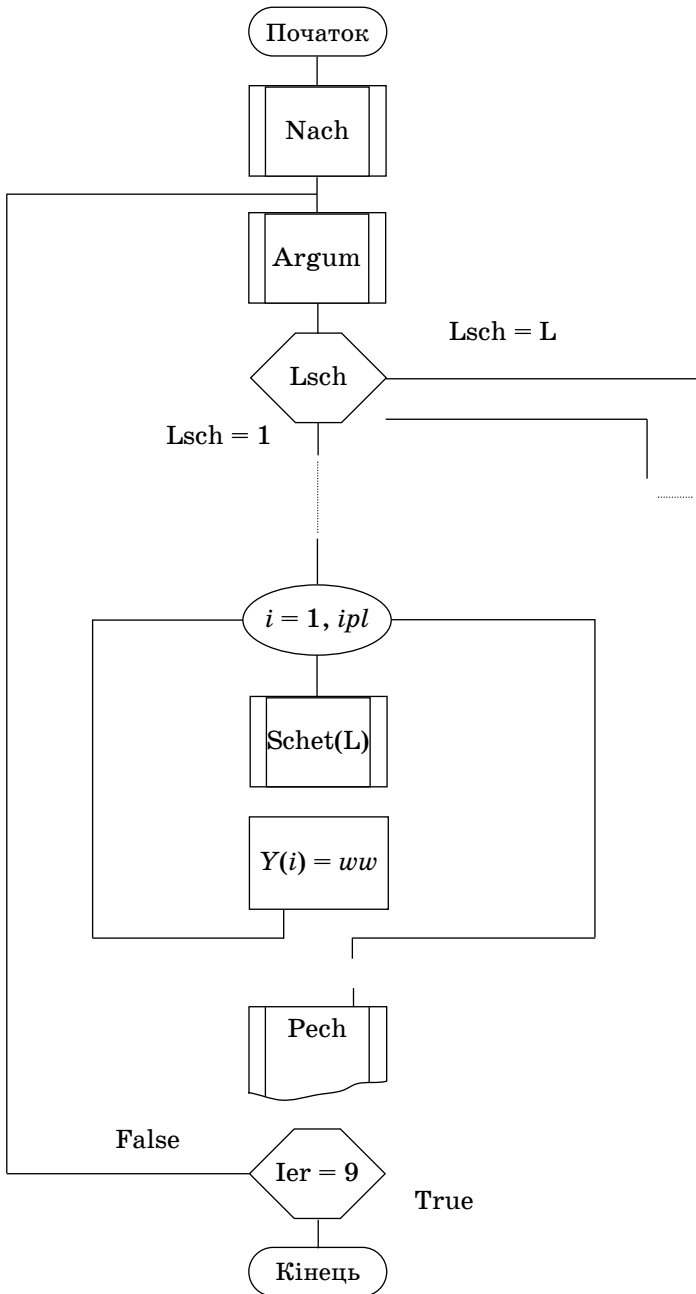


Рис. 6.2. Організація модуля TABUL

Підпрограма ARGUM обчислює, по заданих початковому та кінцевому значеннях інтервалу зміни аргументу та заданому числу вузлів, величину кроку та забезпечує задання конкретних значень аргументу в звичайному, напівлогарифмічному чи логарифмічному масштабі.

Нарешті, підпрограма PECH запам'ятовує дане значення аргументу і відповідні йому $iplot$ значень інформативного параметра підпрограми SCHET(n) (із заданим кроком — підряд, через один тощо), записує їх до файлу Resalt.DAT разом з необхідними іменами та службовими кодами і формує код IER = 9 при завершенні проходу по всьому інтервалу зміни аргументу.

Таким чином, результати обчислень можуть бути інтерпретовані у вигляді графіків і виведені на екран монітора чи на принтер за допомогою довільного стандартного графічного пакету. У роботі для цього було використано пакет «Графор». Його підтримують сервісні програми GRFdsp (для виведення графіків на екран монітора) та GRFprn (для отримання твердих копій на принтері чи плоттері).

Графіки можуть бути побудовані як у звичайному, так і в логарифмічному масштабі з відповідними коментарями. Передбачена можливість налагодження зображення (практично на 100%) за допомогою файлу DSPLG.DAT для програми GRFdsp, та файлу PRNLG.DAT для програми GRFprn. Тобто, без редагування та перекомпіляції тексту самої сервісної програми.

Звичайно, на даний момент широко відомі та поширені математичні пакети MATLAB, MATHCAD тощо, які надають широкий набір засобів для розв'язання різноманітних математичних задач. Однак, на наш погляд, наразі немає серйозних мотивів для пошуку альтернативи алгоритмічним мовам Fortran та C++ під час вирішення задач обчислювального експерименту.

РОЗДІЛ 2. МЕТОДИКА РОЗРАХУНКУ РІВНЯ ЛЕГУВАННЯ У ПРОСТИХ ОКИСЛАХ МЕТАЛІВ

2.1. Постановка задачі

Степінь об'ємного легування або рівень об'ємного легування характеризується або параметром λ , який визначається співвідношенням (2.1.10), або параметром u_B , який визначається співвідношенням (2.1.8), тобто фактично однозначно залежить

від положення рівня Фермі в об'ємі матеріалу металоокислу. Тому рівняння електронейтральності для об'ємної фази можна записати:

$$\rho = \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \lambda - \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \lambda^{-1} + c * \sum_{r=1}^w \xi_r(u_B), \quad (1)$$

так і в еквівалентному йому вираженні:

$$\rho = \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \exp(-u_B) - \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \exp(u_B) + c * \sum_{r=1}^w \xi_r(u_B), \quad (2)$$

де

$$\xi_r(u_B) = c_r \frac{S_r(u_B)}{D_r(u_B)}, \quad (3)$$

якщо задана повна концентрація точкових дефектів r -сорту, або

$$\xi_r(u_B) = c_r^0 S_r(u_B), \quad (4)$$

якщо задана концентрація точкових дефектів r -сорту в нейтральному стані.

Відповідно до [11] будемо розрізняти пряму та обернену задачі. Під прямою будемо розуміти задачу розрахунку положення рівня Фермі (ступені об'ємного легування) у забороненій зоні кристалу окисла по відомих електрофізичних характеристиках і концентраціях атомів компонент матеріалу чутливого елементу. Під оберненою будемо розуміти задачу розрахунку необхідної концентрації атомів легуючої домішки, виходячи із заданого положення рівня Фермі (заданої ступені об'ємного легування) та відомих електрофізичних характеристик і концентрацій часток інших компонент матеріалу ЧЕ.

Обернена задача в термінах розробленого формалізму легко розв'язується в явному вигляді. Застосовуючи рівняння (2) з урахуванням співвідношення (3), можна отримати:

$$c_k = -\frac{D_k(u_B)}{c * S_k(u_B)} \left(\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \exp(-u_B) - \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \exp(u_B) + c * \sum_{r \neq k}^w \xi_r(u_B) \right), \quad (5)$$

якщо потрібно визначити повну концентрацію легуючої домішки k -сорту, або:

$$c_k^0 = -\frac{1}{c * S_k(u_B)} \left(\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \exp(-u_B) - \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \exp(u_B) + c * \sum_{r \neq k}^w \xi_r(u_B) \right), \quad (6)$$

якщо потрібно визначити концентрацію легуючої домішки k -сорту в нейтральному стані.

Стосовно ж прямої задачі у загальному випадку тут необхідно розв'язувати нелінійні рівняння, як по відношенню до параметра λ , так і по відношенню до параметра u_B . Однак, якщо по відношенню до параметра u_B отримуємо співвідношення загального вигляду, то відносно параметра λ відповідні рівняння завжди можна записати як многочлени по степенях або λ , або λ^{-1} . Дійсно, вирази $D_r(\lambda)$ та $S_r(\lambda)$ мають вигляд:

$$D_r(\lambda) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} H_{rj}(\lambda); \quad (7)$$

$$S_r(\lambda) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} j \cdot H_{rj}(\lambda); \quad (8)$$

$$H_{rj}(u_B) = p_{rj} \cdot \lambda^j. \quad (9)$$

З іншого боку, якщо для всіх w компонент матеріалу ЧЕ задані їх повні концентрації, то рівняння (1) дає:

$$\left(\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \lambda - \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \lambda^{-1} \right) \prod_{r=1}^w D_r(\lambda) + c * \sum_{r=1}^w \left[c_r S_r(\lambda) \prod_{i \neq r}^w D_i(\lambda) \right] = 0. \quad (10)$$

Аналогічно, якщо для всіх w компонент матеріалу ЧЕ задані їх концентрації в нейтральному стані, то отримуємо:

$$\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \lambda - \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \lambda^{-1} + c * \sum_{r=1}^w c_r^0 S_r(\lambda) = 0. \quad (11)$$

Як бачимо, обидва рівняння (10) та (11) після підстановки в них степінних многочленів (7) та (8) і виконання відповідних алгебраїчних перетворень можна привести до вигляду поліномів або по степенях λ , або по степенях λ^{-1} .

2.2. Чисті металоокисні кристали

Розглянемо як ілюстрацію найпростіший випадок, який нерідко реалізується на практиці в чистих нестехіометричних сполуках.

1. Нехай в окислі металу наявна єдина донорна присадка, що формує n зарядових станів у забороненій зоні і має повну концентрацію c_D (у відносних одиницях). А тоді, якщо знехтувати концентрацією неосновних носіїв заряду (дірок), рівняння електронейтральності (10) можна переписати у вигляді:

$$\left(\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \lambda - \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \lambda^{-1} \right) \prod_{r=1}^w D_r(\lambda) + c * \sum_{r=1}^w \left[c_r S_r(\lambda) \prod_{i \neq r}^w D_r(\lambda) \right] = 0; \quad (12)$$

$$D_r(\lambda) - c * c_r S_r(\lambda) \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \cdot \lambda = 0.$$

Підставляючи сюди співвідношення (7) та (8) після алгебраїчних перетворень, отримуємо наступний степеневий многочлен:

$$\begin{aligned} & a_0(\lambda^{-1})^{n_D+1} + a_1(\lambda^{-1})^{n_D} + a_2(\lambda^{-1})^{n_D-1} + \dots + \\ & + a_i(\lambda^{-1})^{n_D+1-i} + \dots + a_{n_D}(\lambda^{-1}) + a_{n_D+1} = 0, \end{aligned} \quad (13)$$

де

$$\begin{aligned} & a_0 = 1, \quad a_1 = a_{D1}; \\ & a_i = \left[a_{Di} - (i-1) \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \cdot c * c_D \right] \cdot \prod_{j=1}^{i-1} a_{Dj}, \quad i = \overline{1, n_D}; \end{aligned} \quad (14)$$

$$a_{n_D+1} = -n_D \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \cdot c * c_D \cdot \prod_{j=1}^{n_D} a_{Dj};$$

$$a_{Dj} = \gamma_{Dj} \exp\left(\frac{E_{Dj} - E_i}{kT}\right).$$

Якщо ж задана неповна концентрація донорів, а їх концентрація в нейтральному стані, то рівняння електронейтральності (11) дає:

$$1 - c * c_D^0 S_D(\lambda) \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \cdot \lambda = 0. \quad (15)$$

Звідки, підставляючи вираз (8) і виконавши алгебраїчні перетворення, отримуємо:

$$\begin{aligned} & a_1(\lambda^{-1})^{n_D+1} + a_2(\lambda^{-1})^{n_D-1} + a_3(\lambda^{-1})^{n_D-2} + \dots + \\ & + a_i(\lambda^{-1})^{n_D+1-i} + \dots + a_{n_D}(\lambda^{-1}) + a_{n_D+1} = 0, \end{aligned} \quad (16)$$

де

$$\begin{aligned} & a_1 = 1; \\ & a_i = -(i-1) \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \cdot c * c_D \cdot \prod_{j=1}^{i-1} a_{Dj}, \quad i = \overline{2, n_D+1}; \end{aligned} \quad (17)$$

$$a_{Dj} = \gamma_{Dj} \exp\left(\frac{E_{Dj} - E_i}{kT}\right).$$

2. Нехай в окислі металу наявна єдина акцепторна присадка, яка формує n зарядових станів у забороненій зоні і має повну концентрацію c (у відносних одиницях). А тоді, якщо знехтувати концентрацією неосновних носіїв заряду, рівняння електронейтральності можна переписати у вигляді:

$$D_A(\lambda^{-1}) - c * c_A S_A(\lambda^{-1}) \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \cdot \lambda^{-1} = 0. \quad (18)$$

Підставляючи сюди співвідношення (7) та (8) після алгебраїчних перетворень, отримаємо наступний степеневий многочлен:

$$b_0 \lambda^{n_A+1} + b_1 \lambda^{n_A} + b_2 \lambda^{n_A-1} + \dots + b_i \lambda^{n_A+1-i} + \dots + b_{n_A} \lambda + b_{n_A+1} = 0, \quad (19)$$

де

$$b_0 = 1, \quad b_1 = b_{A1};$$

$$b_i = \left[b_{Ai} - (i-1) \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \cdot c * c_A \right] \cdot \prod_{j=1}^{i-1} b_{Aj}, \quad i = \overline{1, n_A}; \quad (20)$$

$$b_{n_A+1} = -n_A \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \cdot c * c_A \cdot \prod_{j=1}^{n_A} b_{Aj};$$

$$b_{Aj} = \frac{1}{\gamma_{Aj}} \exp\left(-\frac{E_{Aj} - E_i}{kT}\right).$$

Якщо ж задана концентрація акцепторів у нейтральному стані, то рівняння електронейтральності (11) має вигляд:

$$1 - c * c_A S_A(\lambda^{-1}) \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \cdot \lambda^{-1} = 0. \quad (21)$$

Звідки, підставивши співвідношення (8) і виконавши алгебраїчні перетворення, знайдемо:

$$b_1 \lambda^{n_A+1} + b_2 \lambda^{n_A-1} + b_3 \lambda^{n_A-2} + \dots + b_i \lambda^{n_A+1-i} + \dots + b_{n_A} \lambda + b_{n_A+1} = 0, \quad (22)$$

де

$$b_1 = 1;$$

$$b_i = -(i-1) \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \cdot c * c_A \cdot \prod_{j=1}^{i-1} b_{Aj}, \quad i = \overline{2, n_A + 1}; \quad (23)$$

$$b_{Aj} = \frac{1}{\gamma_{Aj}} \exp\left(-\frac{E_{Aj} - E_i}{kT}\right).$$

Розв'язання таких рівнянь, аж до четвертого степеня, можна отримати в явному вигляді, якщо скористатись відомими формулами (наприклад, формулами Кардано для кубічного рівняння, чи формулами Декарта — Ейлера для рівняння четвертого степеня). Якщо ж результуючі співвідношення недостатньо наглядні, можна скористатися відповідними програмними реалізаціями означених формул, які звичайно наявні в більшості математичних пакетів прикладних програм.

Для визначення коренів поліномів більш високого степеня можна застосувати як загальні методи розв'язання нелінійних рівнянь, так і методи, розроблені спеціально для поліноміальних рівнянь (метод Лагерра — Берстоу, QR-розкладу тощо).

Зазначимо, що такі перетворення практично можна виконати тільки у випадку помірної кількості доданків виду (3) та при невисоких степенях λ у них. Як правило, якщо область зміни положення рівня Фермі в задачі визначена і не занадто широка, то можна з'ясувати, які сорти ТД та які їх зарядові стани будуть домінувати у зарядових сумах, а якими можна знехтувати. Далі, згідно з викладеним у монографії [15], відповідні компоненти можна або спростити, або відкинути, так що в отриманому рівнянні без особливих труднощів можна виконати операції приведення дробів до загального знаменника та операції приведення подібних при відповідних степенях λ .

2.3. Чистий окисел олова

Як відомо [16], у чистому окислі олова SnO_2 за помірних температур реалізується дефектна структура з дефіцитом кисню. Виникаючі у цьому разі власні точкові дефекти — вакансії кисню — виконують роль одно- та двозарядних донорів. За цих умов мають місце такі електрофізичні характеристики:

$$E_{D1} - E_i = 1,765 \text{ eV}; E_{D2} - E_i = 1,655 \text{ eV}; E_G / 2 = 1,8 \text{ eV}.$$

1. Якщо кристал не знаходиться у стані термодинамічної рівноваги з оточуючим газовим середовищем, тобто концентрації вакансій задані величини і їх величина не змінюється в результаті експерименту (як правило це має місце за невисоких температур), то співвідношення (13)–(14) набувають вигляду кубічного рівняння загального виду:

$$x^3 + a_1 x^2 + a_2 x + a_3 = 0,$$

де

$$\begin{aligned} a_1 &= a_{D1}; \\ a_2 &= a_{D1}(a_{D2} - c^* c_D) = a_1(a_{D2} - c^* c_D); \\ a_3 &= -2c^* c_D a_{D1} a_{D2} = -2c^* c_D a_{D2} a_1, \end{aligned}$$

причому:

$$\begin{aligned} a_{D1} &= \gamma_{D1} \exp\left(\frac{E_{D1} - E_i}{kT}\right); \\ a_{D2} &= \gamma_{D2} \exp\left(\frac{E_{D2} - E_i}{kT}\right); \\ c^* &= \frac{c_1^*}{n_i}; \\ n_i &= n_{i0} T^{3/2} \exp\left(-\frac{E_G}{2kT}\right); \\ c_1^* &\approx 10^{28} m^{-3}. \end{aligned}$$

Розв'язуючи це рівняння, можна знайти залежність рівня легування від концентрації власних точкових дефектів при заданих умовах експерименту, тобто розв'язати пряму задачу. Шляхом нескладних алгебраїчних перетворень можна отримати аналогічне співвідношення для оберненої задачі. Маємо:

$$\begin{aligned} a_2 &= a_{D1} a_{D2} - a_{D1} c^* c_D = a_{20} - a_{21} c_D; \\ a_3 &= -2c^* c_D a_{D1} a_{D2} = -a_{30} c_D, \end{aligned}$$

де позначено:

$$\begin{aligned} a_{20} &= a_{D1} a_{D2}; \\ a_{21} &= a_{D1} c^*; \\ a_{30} &= 2c^* a_{D1} a_{D2} = 2c^* a_{20}. \end{aligned}$$

А тоді:

$$\begin{aligned} x^3 + a_1 x^2 + (a_{20} - a_{21} c_D) x - a_{30} c_D &= 0; \\ x^3 + a_1 x^2 + a_{20} x &= (a_{21} x + a_{30}) c_D. \end{aligned}$$

Звідки отримуємо просту формулу для розрахунку необхідної концентрації точкових дефектів по заданому рівню легування та визначених умовах експлуатації матеріалу:

$$c_D = \frac{x^3 + a_1 x^2 + a_{20} x}{a_{21} x + a_{30}}.$$

2. Якщо кристал знаходиться у стані термодинамічної рівноваги з оточуючим газовим середовищем, тобто концентрації вакансій не є фіксованими величинами і їх значення змінюється у процесі експерименту (як правило, це має місце за більш високих температур), то співвідношення (16)–(17) набувають вигляду неповного кубічного рівняння:

$$x^3 + a_2^0 x + a_3^0 = 0,$$

де

$$a_2^0 = -\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} a_{D1} c^* c_D^0;$$

$$a_3^0 = -\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} c^* a_{D1} a_{D2} c_D^0.$$

Розв'язуючи його, можна знайти залежність рівня легування від концентрації власних точкових дефектів при заданих умовах експерименту, тобто розв'язати пряму задачу. Шляхом нескладних алгебраїчних перетворень можна отримати аналогічне співвідношення для оберненої задачі. Маємо:

$$a_2^0 = -\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} a_{D1} c^* c_D^0 = -a_{20}^0 c_D^0;$$

$$a_3^0 = -\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} c^* a_{D1} a_{D2} c_D^0 = -a_{30}^0 c_D^0;$$

$$a_{20}^0 = \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} a_{D1} c^*;$$

$$a_{30}^0 = \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} c^* a_{D1} a_{D2}.$$

А тоді:

$$x^3 - a_{20}^0 x c_D^0 - a_{30}^0 c_D^0 = 0;$$

$$x^3 = (a_{20}^0 x + a_{30}^0) c_D^0.$$

Звідки отримуємо просту формулу для розрахунку необхідної концентрації точкових дефектів по заданому рівню легування та визначених умовах експлуатації матеріалу:

$$c_D^0 = \frac{x^3}{a_{20}^0 x + a_{30}^0}.$$

Повертаючись знову до прямої задачі, пригадаємо, що неповне кубічне рівняння

$$y^3 + py + q = 0$$

має дійсний корінь, який дається наступними співвідношеннями (формулами Кардано):

$$\begin{aligned} y_1 &= u + v; \\ u &= \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{D}}; \\ v &= \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{D}}; \\ D &= \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2. \end{aligned}$$

У нашому випадку:

$$\begin{aligned} p &= -a_{20}^0 c_D^0 = q / a_{D2}; \\ q &= -a_{30}^0 c_D^0 = p a_{D2} \end{aligned}$$

та

$$D = \frac{1}{(3a_{D2})^3} q^3 + \frac{1}{4} q^2 = \left(\frac{q}{2}\right)^2 \left(1 + \frac{4}{(3a_{D2})^3} q\right)$$

або:

$$\sqrt{D} = \left|\frac{q}{2}\right| \sqrt{1 + \frac{4}{(3a_{D2})^3} q} = \left|\frac{q}{2}\right| \sqrt{1 + \frac{4}{27(a_{D2})^2} p} = \left|\frac{q}{2}\right| \sqrt{D_0},$$

де

$$D_0 = 1 + \frac{4}{27(a_{D2})^2} p = 1 - \frac{4a_{20}^0 c_D^0}{27(a_{D2})^2}.$$

А тоді:

$$\begin{aligned} u &= \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \left|\frac{q}{2}\right| \sqrt{D_0}} = -\sqrt[3]{\frac{q}{2}} \sqrt[3]{1 - \frac{|q|}{q} \sqrt{D_0}} = -\sqrt[3]{\frac{q}{2}} \sqrt[3]{1 - \text{sign}(q) \sqrt{D_0}}; \\ v &= \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \left|\frac{q}{2}\right| \sqrt{D_0}} = -\sqrt[3]{\frac{q}{2}} \sqrt[3]{1 + \frac{|q|}{q} \sqrt{D_0}} = -\sqrt[3]{\frac{q}{2}} \sqrt[3]{1 + \text{sign}(q) \sqrt{D_0}}, \end{aligned}$$

так що

$$\begin{cases} \lambda^{-1} = y_1 = u + v = -\sqrt[3]{\frac{q}{2}}(\sqrt[3]{1 - \text{sign}(q)\sqrt{D_0}} + \sqrt[3]{1 + \text{sign}(q)\sqrt{D_0}}) \\ u \cdot v = -\frac{p}{3} \end{cases}$$

3. Для повноти картини розглянемо найпростіший випадок — однозарядний донорний центр у кристалі n -типу провідності:

$$c_D \frac{a_{D1}\lambda}{1 + a_{D1}\lambda} = \beta^{-1} n_i \lambda^{-1};$$

$$\beta = \sqrt{\frac{N_V}{N_C}}.$$

Після нескладних алгебраїчних перетворень

$$c_D \frac{a_{D1}\lambda}{1 + a_{D1}\lambda} = \beta^{-1} n_i \lambda^{-1};$$

$$\beta c_D n_i^{-1} a_{D1} \lambda^2 = 1 + a_{D1} \lambda;$$

$$1 + a_{D1} \lambda - \beta c_D n_i^{-1} a_{D1} \lambda^2 = 0,$$

отримуємо наведене квадратне рівняння:

$$\lambda^{-2} + a_{D1} \lambda^{-1} - \beta c_D n_i^{-1} a_{D1} = 0$$

корені якого

$$\lambda^{-1}_{1,2} = -\frac{1}{2} a_{D1} \pm \sqrt{\left(\frac{a_{D1}}{2}\right)^2 + \beta c_D n_i^{-1} a_{D1}} = \frac{a_{D1}}{2} \left[-1 \pm \sqrt{1 + \frac{4\beta c_D}{n_i a_{D1}}} \right].$$

Оскільки рівень легування за означенням — величина додатня, то шукана залежність має вигляд:

$$\lambda^{-1} = \frac{a_{D1}}{2} \left[-1 + \sqrt{1 + \frac{4\beta c_D}{n_i a_{D1}}} \right].$$

Якщо виконуються умови, за яких має місце нерівність:

$$\frac{4\beta c_D}{n_i a_{D1}} \gg 1,$$

то:

$$\lambda^{-1} \approx 2 \sqrt{\frac{\beta c_D}{n_i} a_{D1}}.$$

2.4. Питання чисельних розрахунків

Як висновок — зазначимо, що викладена вище методика зручна або у простих випадках, коли домінує одна багатозарядна домішка, або ж, коли рівень Фермі змінюється в обмеженому діапазоні, так що можна спростити відповідні співвідношення. Ще одним недоліком такого підходу є необхідність конструювання своєї програми обчислення коефіцієнтів поліному, який отримуємо після відповідних алгебраїчних перетворень.

А тому в ряді випадків доцільно розв'язувати рівняння електронейтральності у загальному вигляді. Основним методом знаходження коренів нелінійних алгебраїчних рівнянь є метод Ньютона [3], якому властива лінійна збіжність на початку ітераційного процесу та квадратична в деякій околиці шуканого кореня. Для його застосування необхідно мати підпрограми обчислення для довільного значення аргументу значень як самої функції, що описує сумарний заряд в об'ємі, так і її похідних по цьому аргументу.

У розроблених програмах розрахунок рівня легування можна проводити як відносно змінної u_B , так і відносно змінної λ^{z_0} . Причому $z_0 = 1$, якщо наявне значення змінної $\lambda^{-1} < 1,0$ та $z_0 = -1$, якщо $\lambda^{-1} \geq 1,0$. При розв'язуванні задачі відносно змінної u_B , алгоритми обчислення функції F , що описує заряд в об'ємі кристалу окисла, та її похідної ґрунтовані на наступних співвідношеннях:

$$F = \sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \exp(-u_B) - \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \exp(u_B) + c * \sum_{r=1}^w \xi_r(u_B);$$

$$DF = -\sqrt{\frac{N_V}{N_C}} \exp(-u_B) + \sqrt{\frac{N_C}{N_V}} \exp(u_B) + c * \sum_{r=1}^w \xi'_r(u_B),$$

де

$$\xi_r(u_B) = \begin{cases} c_r \frac{S_r(u_B)}{D_r(u_B)}; \\ c_r^0 S_r(u_B) \end{cases}$$

$$\xi'_r(u_B) = \begin{cases} c_r \frac{S'_{0r}(u_B) D_r(u_B) + S_r^2(u_B)}{D_r^2(u_B)}; \\ c_r^0 \cdot S'_{0r}(u_B) \end{cases};$$

$$D_r(u_B) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} H_{rj}(u_B);$$

$$S_r(u_B) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} j \cdot H_{rj}(u_B);$$

$$S'_{0r}(u_B) = \sum_{j=n_r^-}^{n_r^+} j^2 \cdot H_{rj}(u_B);$$

$$H_{rj}(u_B) = p_{rj} \exp(-j \cdot u_B).$$

Величини, що визначають відповідні доданки в рівняннях (1) та (2), описуються співвідношеннями (7)–(9). Приведемо їх до вигляду, що дає змогу раціонально організувати процес обчислень — тобто мінімізувати кількість операцій піднесення до степені та операцій множення, замінюючи їх по можливості операціями з більш низьким пріоритетом (відповідно множенням та додаванням-відніманням). Виконавши відповідні перетворення, отримаємо:

$$H_{rl} = \left\{ \prod_{j=1}^l \gamma_{rj} \cdot \exp \left[\frac{1}{kT} \sum_{j=1}^l \Delta E_{rj} - l u_B \right] \right\}^{z_l};$$

$$\Delta E_{rj} = E_{rj} - E_i;$$

$$z_l = \text{sign}(l).$$

Результати застосування запропонованої методики наведені на рис. 6.3, 6.4, 6.5.

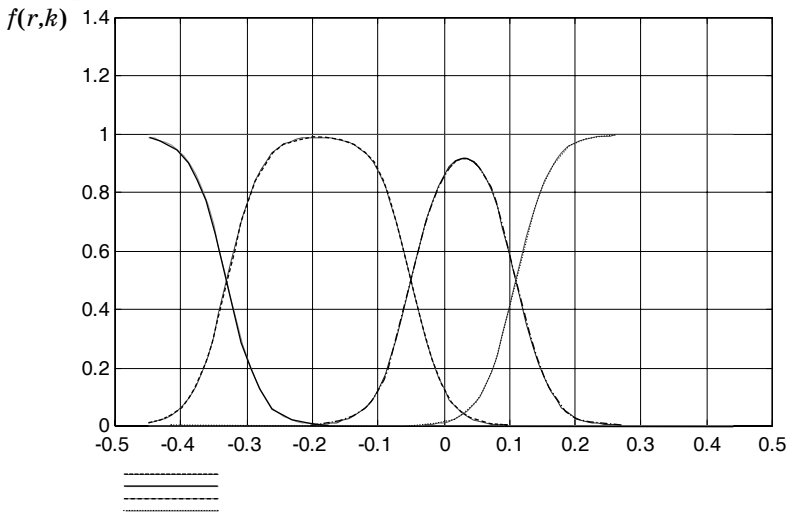


Рис. 6.3. Домішка міді (Cu) у кристалі германію (Ge). У забороненій зоні германію утворюються два акцепторні й один донорний рівень [12]:

$$E_D = E_V = +0,04 \text{ eВ}; E_{A1} = E_V = +0,32 \text{ eВ}; E_{A2} = E_C = -0,26 \text{ eВ}.$$

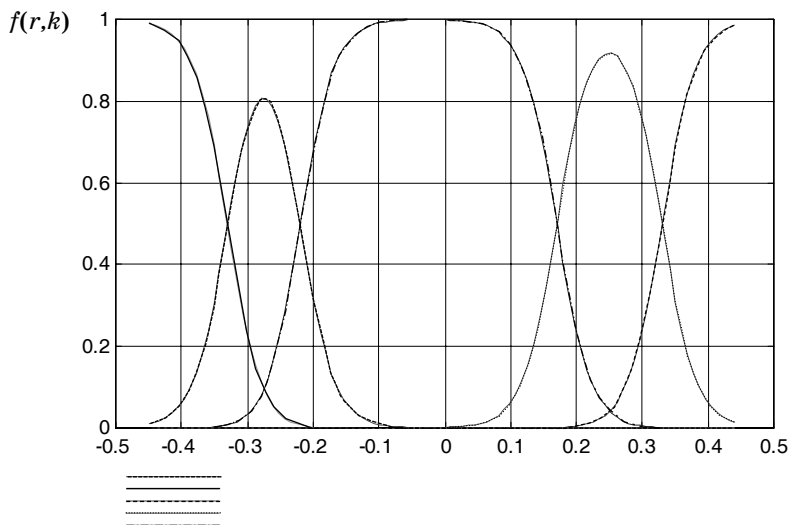


Рис. 6.4. Домішка золота (Au) у кристалі германію (Ge). У забороненій зоні германію утворюються три акцепторні й один донорний рівень [12]:

$$E_D = E_V + 0,04 \text{ eV}; E_{A1} = E_V + 0,15 \text{ eV};$$

$$E_{A2} = E_C - 0,2 \text{ eV}; E_{A3} = E_C - 0,04 \text{ eV}$$

РОЗДІЛ 3. МЕТОДИКА РОЗРАХУНКУ ПОВЕРХНЕВОГО ПОТЕНЦІАЛЬНОГО БАР'ЄРА У ШАРІ НАПІВПРОВІДНИКА СУБМІКРОННИХ РОЗМІРІВ

Мінімальною постановкою задачі, що дає змогу аналізувати широке коло задач, є апроксимація елементів макроструктури матеріалу чутливого елементу плоскою пластиною. Методика розрахунку поверхневого потенціалу в цьому випадку основана на результатах глави VI та полягає в такому. Спочатку виконують розрахунок значень рівня легування, а також поверхневого потенціалу на поверхні та в точці, де напруженість електричного поля дорівнює нулю, спираючись на наступну систему диференційних та інтегро-алгебраїчних рівнянь:

$$\dot{N}_1 = f_1(p, T, t);$$

$$N_{S1}(N_1, u_1) - z_{S1} \cdot F_{ON} \cdot F(u_B, u_1, u_0) = 0;$$

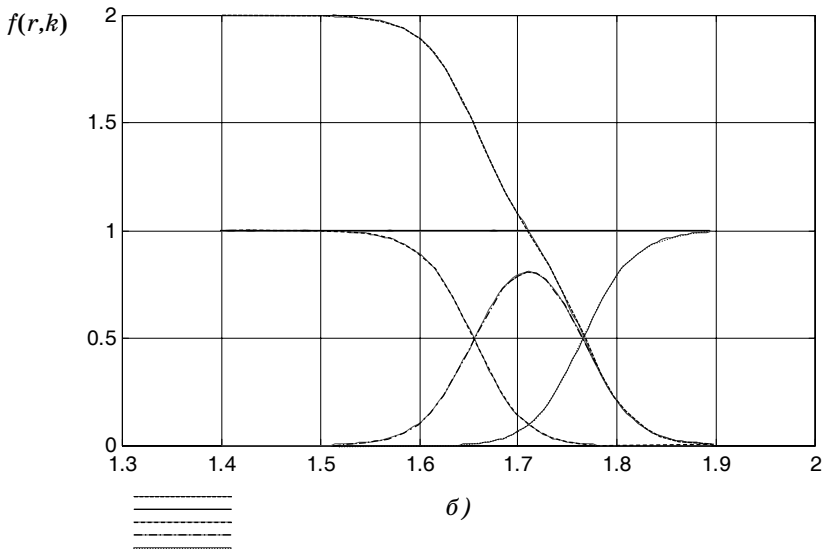
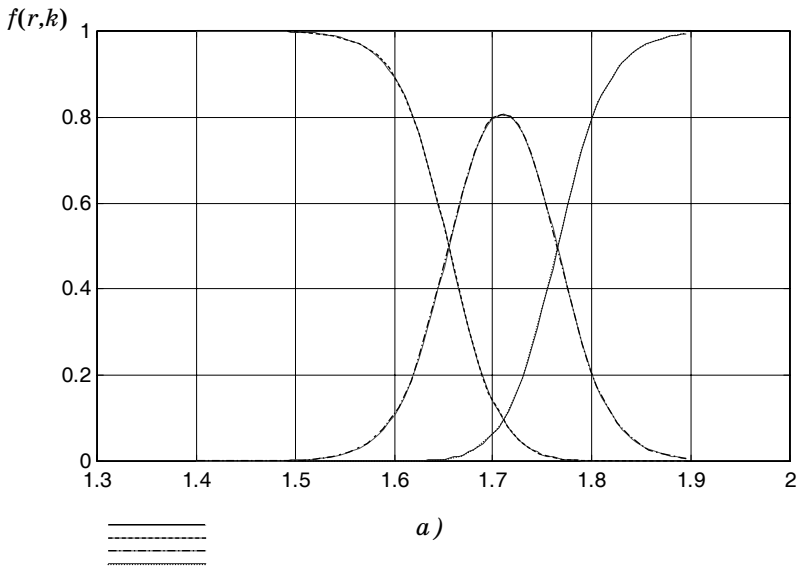


Рис. 6.5. Залежність заряду
вакансій кисню в діоксиді олова
від положення рівня Фермі [16]

$$l_D^{-1}(x_2 - x_1) = z_{S1} \cdot \int_{u_1}^{u_0} F^{-1}(u_B, u_0, u) du + z_{S2} \cdot \int_{u_0}^{u_2} F^{-1}(u_B, u_0, u) du; \quad (1)$$

$$N_{S2}(N_2, u_2) - z_{S2} \cdot F_{ON} \cdot F(u_B, u_2, u_0) = 0; \quad (2)$$

$$\dot{N}_2 = f_2(p, T, t);$$

$$c_v = c_v(N, p, T);$$

$$\rho(c_v, u_B) = 0.$$

Далі розрахунок залежності потенціалу від координати виконують за формулами:

$$x = x_0 - z_{S1} \cdot l_D \cdot \int_u^{u_0} F^{-1}(u, u_0) du, \quad \text{при } x_1 \leq x \leq x_0, \quad (3)$$

$$x = x_0 + z_{S2} \cdot l_D \cdot \int_{u_0}^u F^{-1}(u, u_0) du, \quad \text{при } x_0 \leq x \leq x_2, \quad (4)$$

де x_0, u_0 значення координати та значення потенціалу для точки напівпровідника, в якій напруженість електричного поля дорівнює нулю. Причому координату x_0 визначають або за формулою:

$$x_0 = x_1 + z_{S1} \cdot l_D \cdot \int_{u_1}^{u_0} F^{-1}(u, u_0) du, \quad (5)$$

або за формулою:

$$x_0 = x_2 - z_{S2} \cdot l_D \cdot \int_{u_0}^{u_2} F^{-1}(u, u_0) du. \quad (6)$$

У статичному режимі система рівнянь (1) набуває вигляду:

$$N_1 = f_1(p, T);$$

$$N_{S1}(N_1, u_1) - z_{S1} \cdot F_{ON} \cdot F(u_B, u_1, u_0) = 0;$$

$$l_D^{-1}(x_2 - x_1) = z_{S1} \cdot \int_{u_1}^{u_0} F^{-1}(u_B, u_0, u) du + z_{S2} \cdot \int_{u_0}^{u_2} F^{-1}(u_B, u_0, u) du;$$

$$N_{S2}(N_2, u_2) - z_{S2} \cdot F_{ON} \cdot F(u_B, u_2, u_0) = 0;$$

$$N_2 = f_2(p, T);$$

$$c_v = c_v(N, p, T);$$

$$\rho(c_v, u_B) = 0$$

або:

$$N_{S1}(N_1, u_1, p, T) - z_{S1} \cdot F_{ON} \cdot F(u_B, u_1, u_0) = 0;$$

$$\frac{x_2 - x_1}{l_D} = z_{S1} \cdot \int_{u_1}^{u_0} F^{-1}(u_B, u_0, u) du + z_{S2} \cdot \int_{u_0}^{u_2} F^{-1}(u_B, u_0, u) du; \quad (7)$$

$$N_{S2}(N_2, u_2, p, T) - z_{S2} \cdot F_{ON} \cdot F(u_B, u_2, u_0) = 0;$$

$$\rho(c_v, p, T, u_B) = 0.$$

Для симетричної постановки задачі отримуємо:

$$N_S(N, u, p, T) - z_S \cdot F_{ON} \cdot F(u_B, u, u_0) = 0;$$

$$\frac{h}{2l_D} = z_S \cdot \int_u^{u_0} F^{-1}(u_B, u_0, u) du; \quad (8)$$

$$\rho(c_v, p, T, u_B) = 0.$$

Тут:

$$F_0 = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{\beta L_D} = 2qn_i L_D;$$

$$F_{0N} = \frac{\varepsilon \varepsilon_0}{q\beta L_D} = 2n_i L_D.$$

Особливості розрахунку рівня легування розглянуто у попередньому розділі. Структуру поверхневого заряду описано у попередній главі. Результуючі системи рівнянь розв'язуються стандартними числовими методами пакету ISML.

ВИСНОВКИ

Розглянуто оригінальні методики розрахунку основних електрофізичних характеристик матеріалу чутливого елемента: 1) рівня легування у простих окислах металів; 2) поверхневого потенціалу при апроксимації елементів макроструктури матеріалу чутливого елемента плоскою пластиною.

Глава VII

ІНФОРМАТИВНІ ПАРАМЕТРИ МАСОПЕРЕНОСУ У СИСТЕМІ ПЛОСКИХ ПЛАСТИН — ОДНОВИМІРНЕ НАБЛИЖЕННЯ

Розв'язки диференційних рівнянь у частинних похідних параболічного типу (теплопровідності та дифузії), що задовольняють краєві умови, дають змогу обчислити стаціонарні і нестаціонарні, локальні й усереднені концентрації та концентраційні потоки. Цього у багатьох випадках було достатньо, щоб задовольнити інженерну практику минулого. Однак сьогодні, на думку деяких авторів [4], неефективність безпосереднього використання розв'язків диференційних рівнянь у частинних похідних параболічного типу для цілей аналізу та синтезу технічних об'єктів можна пояснити, зокрема, і тим, що вони виражаються через складні комбінації членів, які містять у собі неелементарні функції. Громіздкість виразів не дає змоги розглянути фізичну сутність окремих членів вихідних рівнянь та їх взаємозв'язок. Такі розв'язки та розрахунки, що виконуються на їх основі, не завжди дозволяють провести детальний аналіз взаємообумовленого переносу маси на межі тіла і всередині його, вони малоприменні для розв'язання таких сучасних інженерних задач, як корекція та синтез складних інформаційно-вимірювальних систем, що включають елементи різноманітної фізичної природи.

Якщо застосувати перетворення Лапласа за часом, то математична модель переносу речовини в об'єкті в одновимірному випадку зводиться до звичайного диференційного рівняння другого порядку. Розглянемо послідовно дві достатньо загальні задачі масопереносу, які можуть бути розв'язані у просторі зображень за Лапласом.

РОЗДІЛ 1. ІЗОЛЬОВАНА ПЛОСКА ПЛАСТИНА

Нехай наявний шар матеріалу довільної макроструктури, геометричні розміри якого дають змогу апроксимувати його характеристичні фрагменти однорідними плоскими пластинами завтовшки h (див. рис. 7.1). Як і раніше, відповідно до гіпотези Е. Д. Логотетіса та А. Д. Брайлсфорда, розглядаємо поверхню твердого тіла як ідеалізовану границю. А саме — як таку, що на ній дифузанти існують у вигляді своєї поверхневої (тобто шар адсорбату),

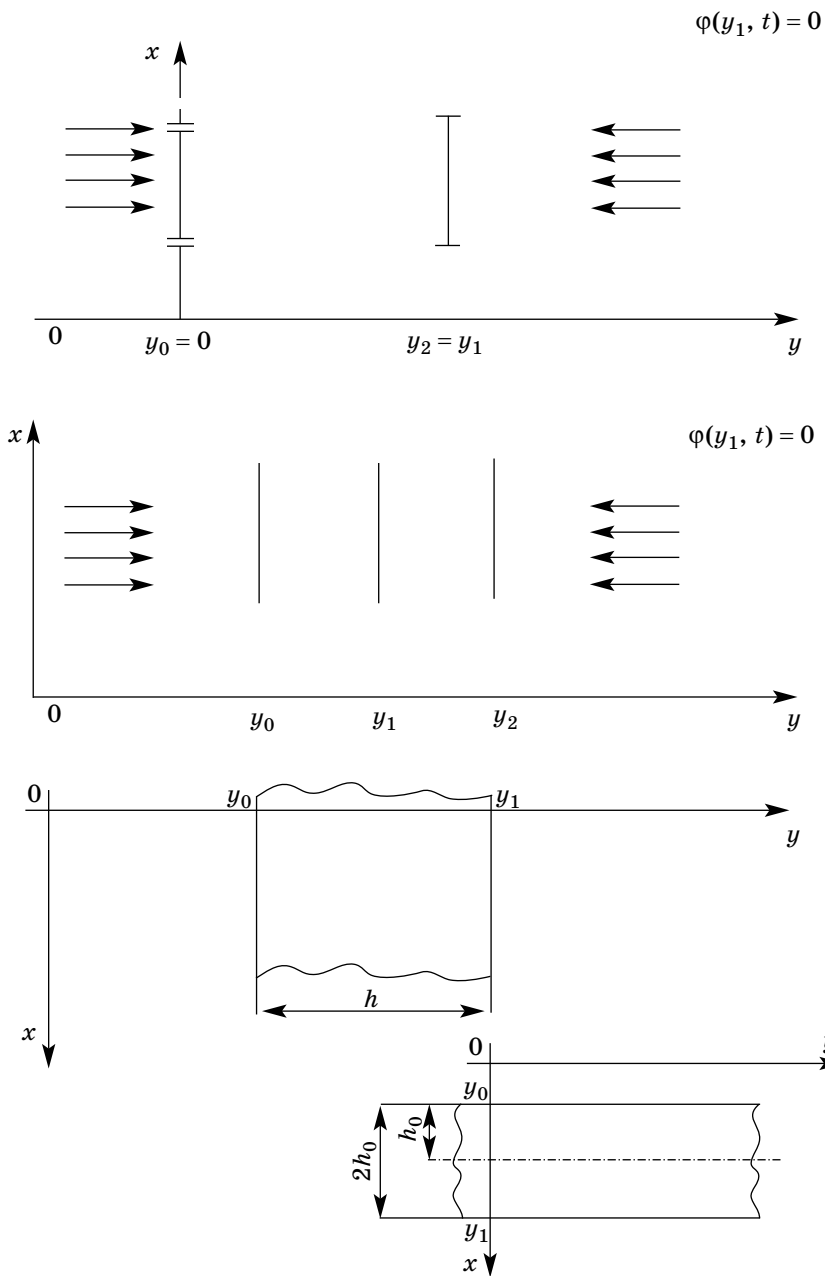


Рис. 7.1.

а під нею — у вигляді об'ємної різновидності (тобто розчинена фаза). Таким чином, на відміну від реальної, вважаємо нашу модельну пластину ізотропною, виключаючи з розгляду власне поверхню. Поверхня нашої моделі являє собою, по суті, приповерхневу область твердого тіла.

Отже, нехай відомий коефіцієнт дифузії D_i i -компоненту в об'ємі пластини. У момент часу $t = 0$, прийнятий за початок відліку, у пластині наявний деякий розподіл концентрації цієї речовини $\tilde{c}(y, 0)$. У наступні моменти часу, при $t > 0$, на кожній з поверхонь концентрації $\tilde{c}_1(y, t)$ та $\tilde{c}_2(y, t)$ змінюються за деякими законами. Введемо нову змінну — надлишкову концентрацію з формули:

$$c(y, t) = \tilde{c}(y, t) - \tilde{c}(y, 0). \quad (1.1)$$

А тоді математична постановка задачі матиме вигляд:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(y, t)}{\partial t} &= D \frac{\partial^2 c(y, t)}{\partial y^2}; \\ c(y, 0) &= 0; \\ c(0, t) &= c(t); \\ c(h, t) &= c_1(t). \end{aligned}$$

З урахуванням нульових початкових умов, у зображеннях за Лапласом рівняння та граничні умови набувають вигляду:

$$s \cdot c(y, s) = D \frac{\partial^2 c(y, s)}{\partial y^2}; \quad (1.2.a)$$

$$c(0, s) = c(s); \quad c(h, s) = c_1(s). \quad (1.2.b)$$

А тоді загальний розв'язок рівняння (2) дається співвідношенням:

$$c(y, s) = A_1 \exp\left(y \sqrt{\frac{s}{D}}\right) + A_2 \exp\left(-y \sqrt{\frac{s}{D}}\right).$$

Позначимо:

$$\begin{aligned} \alpha &= \sqrt{\frac{s}{D}}; \\ A_1 &= \frac{A+B}{2}; \\ A_2 &= \frac{A-B}{2}. \end{aligned}$$

Тоді:

$$c(y, s) = A \cdot ch(\alpha y) + B \cdot sh(\alpha y).$$

З урахуванням граничних умов (2.б) знайдемо постійні інтегрування A та B :

$$A = c_0(s);$$

$$B = \operatorname{csc} h(\alpha h) \cdot c_1(s) - \operatorname{cth}(\alpha h) \cdot c_2(s).$$

Отже, маємо:

$$c(y, s) = [ch(\alpha y) - \operatorname{cth}(\alpha h) \cdot sh(\alpha y)] \cdot c_0(s) + \frac{sh(\alpha y)}{sh(\alpha h)} \cdot c_1(s). \quad (1.3)$$

Узявши інтеграл від співвідношення (1.3) у границях від нуля до h та розділивши його на товщину пластини h

$$c_m(s) = \frac{1}{h} \int_0^h c(y, s) dy,$$

знайдемо середню за товщиною пластини концентрацію дифузанта:

$$c_m(s) = \frac{ch(\alpha h) - 1}{\alpha h \cdot sh(\alpha h)} \cdot [c_0(s) + c_1(s)]. \quad (1.4)$$

Якщо середню за товщиною пластини концентрацію $c_m(s)$ дифузанта вважати за вихідну величину, а значення її $c_0(s)$, $c_1(s)$ на границях — за вхідні величини, то відповідна передаточна функція має вигляд:

$$\begin{aligned} W_{im} &= \frac{ch\left(h\sqrt{\frac{s}{D}}\right) - 1}{h\sqrt{\frac{s}{D}} \cdot sh\left(h\sqrt{\frac{s}{D}}\right)} = \\ &= \frac{\sqrt{D}}{h} \left\{ \operatorname{cth}\left(h\sqrt{\frac{s}{D}}\right) - \operatorname{cosech}\left(h\sqrt{\frac{s}{D}}\right) \right\} \sqrt{s}, \end{aligned}$$

$$i = 0, 1,$$

де

$$W_{0m} = \frac{c_m(s)}{c_0(s)}; \quad W_{1m} = \frac{c_m(s)}{c_1(s)}. \quad (1.5)$$

Якщо задача осесиметрична, тобто $c_0(s) = c_1(s) = c(s)$, можна ввести до розгляду одну передаточну функцію:

$$W_m = \frac{ch\left(h\sqrt{\frac{s}{D}}\right) - 1}{\frac{h}{2}\sqrt{\frac{s}{D}} \cdot sh\left(h\sqrt{\frac{s}{D}}\right)} = \frac{\sqrt{D}}{h_0} \left\{cth\left(h\sqrt{\frac{s}{D}}\right) - \operatorname{cosech}\left(h\sqrt{\frac{s}{D}}\right)\right\} \sqrt{s}, \quad (1.6)$$

де враховано (див. рис. 7.1), що $h = 2h_0$.

РОЗДІЛ 2. БІНАРНА СИСТЕМА ПЛОСКИХ ПЛАСТИН

Нехай наявні аналогічні попередній постановці задачі дві (див. рис. 7.2) ізотропні нескінченні пластини, розташовані поряд. Відомі константи розчинності k_1 і k_2 дифузанта та його коефіцієнти дифузії D_1 і D_2 в кожній із пластин.

У момент часу $t = 0$, прийнятий за початок відліку, у пластинах наявний деякий розподіл концентрації дифузанта $\bar{c}_1(y, 0)$, $\bar{c}_2(y, 0)$. У наступні моменти часу, при $t > 0$, на кожній із зовнішніх поверхонь концентрації $\bar{c}_{10}(y, t)$, $\bar{c}_{20}(y, t)$ змінюються за деякими законами, а на внутрішніх — відомі потоки φ_1 , φ_2 . Переходячи далі за формулою (1.1) до надлишкових концентрацій, задачу можна записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1(y, t)}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 c_1(y, t)}{\partial y^2}, \quad y \in (y_0, y_1); \\ \frac{\partial c_2(y, t)}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 c_2(y, t)}{\partial y^2}, \quad y \in (y_1, y_2); \\ c_1(y, 0) &= 0; \\ c_2(y, 0) &= 0; \\ c_1(y_0, t) &= c_{10}(t); \\ c_2(y_2, t) &= c_{22}(t); \\ D_1 \frac{\partial^2 c_1(y, t)}{\partial y^2} \Big|_{y=y_1} &= \varphi_1(t); \end{aligned} \quad (2.1)$$

$$D_2 \frac{\partial^2 c_2(y, t)}{\partial y^2} \Big|_{y=y_1} = \varphi_2(t).$$

З урахуванням нульових початкових умов, у зображеннях за Лапласом рівняння та граничні умови набувають вигляду:

$$\begin{aligned} s \cdot c_1(y, s) &= D_1 \frac{\partial^2 c_1(y, s)}{\partial y^2}, \quad y \in (y_0, y_1); \\ s \cdot c_2(y, s) &= D_2 \frac{\partial^2 c_2(y, s)}{\partial y^2}, \quad y \in (y_1, y_2); \end{aligned} \quad (2.2)$$

$$c_1(y_0, s) = c_{10}(s);$$

$$c_2(y_2, s) = c_{22}(s);$$

$$D_1 \frac{\partial^2 c_1(y, s)}{\partial y^2} \Big|_{y=y_1} = \varphi_1(s);$$

$$D_2 \frac{\partial^2 c_2(y, s)}{\partial y^2} \Big|_{y=y_1} = \varphi_2(s).$$

Розв'язання цієї задачі приводить до наступних співвідношень для концентрації дифузанта в кожній із пластин:

$$c_1(y, s) = \frac{ch[\alpha_1(y_1 - y)]}{ch(\alpha_1 h_1)} \cdot c_{10}(s) - \frac{sh[\alpha_1(y - y)]}{\sqrt{sD_1} \cdot ch(\alpha_1 h_1)} \cdot \varphi_1(s); \quad (2.3.a)$$

$$c_2(y, s) = \frac{ch[\alpha_2(y - y_1)]}{ch(\alpha_2 h_2)} \cdot c_{22}(s) + \frac{sh[\alpha_2(y_2 - y)]}{\sqrt{sD_2} \cdot ch(\alpha_2 h_2)} \cdot \varphi_2(s). \quad (2.3.b)$$

Узявши інтеграл від співвідношення (2.3.a) по поперечному перерізу пластини та розділивши його на товщину пластини h_1 , знайдемо середню за товщиною пластини концентрацію дифузанта в першому шарі:

$$\begin{aligned} c_{1m}(s) &= \frac{1}{h_1} \int_{y_0}^{y_1} c_1(y, s) dy = \\ &= \frac{1}{\alpha_1 h_1} th(\alpha_1 h_1) \cdot c_{10}(s) - \frac{1}{\alpha_1 h_1} \cdot \frac{ch(\alpha_1 h_1) - 1}{\sqrt{sD_1} \cdot ch(\alpha_1 h_1)} \cdot \varphi_1(s). \end{aligned}$$

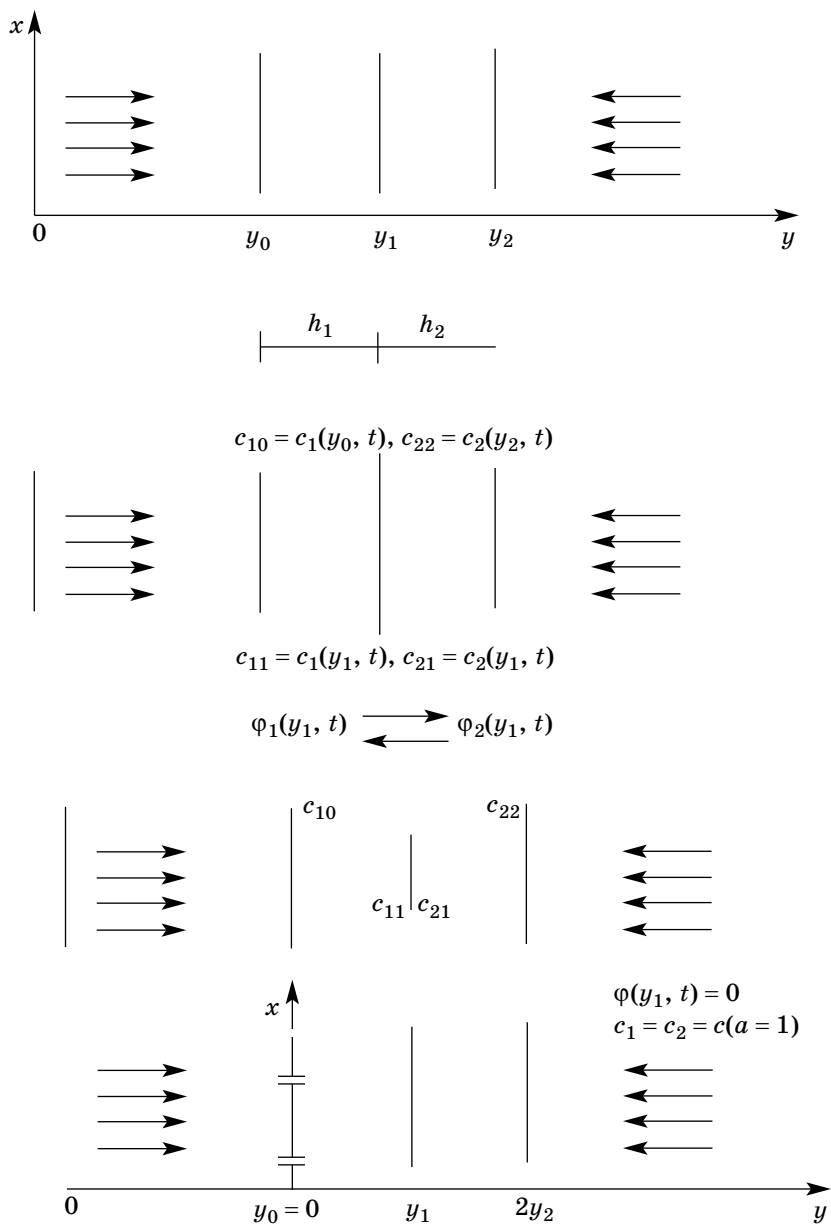


Рис. 7.2.

Концентрація дифузанта в тій же першій пластині на суміжній із наступним шаром межі, тобто при $y = y_1$, дорівнює:

$$c_1(y_1, s) = sch(\alpha_1 h_1) \cdot c_{10}(s) - \frac{th(\alpha_1 h_1)}{\sqrt{sD_1}} \cdot \varphi_1(s). \quad (2.4)$$

Відповідні передаточні функції мають вигляд:

$$W_{c_1}^1(s) = \frac{c_1(y_1, s)}{c_{10}(s)} = sch(\alpha_1 h_1); \quad (2.5)$$

$$W_{\varphi_1}^1(s) = \frac{c_1(y_1, s)}{\varphi_1(s)} = \frac{th(\alpha_1 h_1)}{\sqrt{sD_1}}; \quad (2.6)$$

$$W_{c_1}^{1m}(s) = \frac{c_{1m}(s)}{c_{10}(s)} = \frac{1}{\alpha_1 h_1} th(\alpha_1 h_1); \quad (2.7)$$

$$W_{\varphi_1}^{1m}(s) = \frac{c_{1m}(s)}{\varphi_1(s)} = \frac{1}{\alpha_1 h_1} \cdot \frac{ch(\alpha_1 h_1) - 1}{\sqrt{sD_1} \cdot ch(\alpha_1 h_1)} = \frac{1 - sch(\alpha_1 h_1)}{sh_1}. \quad (2.8)$$

РОЗДІЛ 3. ЧАСТКОВИЙ ВИПАДОК МАСОПЕРЕНОСУ У БІНАРНІЙ СИСТЕМІ ПЛОСКИХ ПЛАСТИН

Якщо виконуються умови

$$\begin{aligned} \varphi_1(s) &= \varphi_2(s) = \varphi(s); \\ \frac{1}{k_1} c_1(y_1, s) &= \frac{1}{k_2} c_2(y_2, s), \end{aligned} \quad (3.1)$$

то рівняння (2.3. a), (2.3. b) дають змогу знайти потік на границі в явному вигляді. Дійсно, при $y = y_1$ маємо:

$$\begin{aligned} c_1(y_1, s) &= sch(\alpha_1 h_1) \cdot c_{10}(s) - \frac{th(\alpha_1 h_1)}{\sqrt{sD_1}} \cdot \varphi_1(s); \\ c_2(y_2, s) &= sch(\alpha_2 h_2) \cdot c_{22}(s) + \frac{th(\alpha_2 h_2)}{\sqrt{sD_2}} \cdot \varphi_2(s), \end{aligned}$$

причому:

$$\begin{aligned} c_2(y, s) &= k_{21} c_1(y, s); \\ k_{21} &= \frac{k_2}{k_1}. \end{aligned}$$

Звідки:

$$\begin{aligned} \varphi(s) = & \frac{\sqrt{sD_1}}{sh(\alpha_1 h_1) \cdot A_{12}} \cdot c_{10}(s) - \\ & - \frac{\sqrt{sD_2}}{ch(\alpha_2 h_2) \cdot A_{21}} \cdot c_{22}(s), \end{aligned} \quad (3.2)$$

де

$$\begin{aligned} A_{12} &= 1 + k_{12} \sqrt{D_{12}} \cdot th(\alpha_1 h_1) \cdot cth(\alpha_2 h_2); \\ A_{21} &= 1 + k_{21} \sqrt{D_{21}} \cdot th(\alpha_2 h_2) \cdot cth(\alpha_1 h_1); \\ k_{12} &= \frac{k_1}{k_2}; \\ D_{12} &= \frac{D_1}{D_2}; \\ k_{21} &= \frac{k_2}{k_1}; \\ D_{21} &= \frac{D_2}{D_1}. \end{aligned}$$

Підставляючи отримане співвідношення для потоку дифузанта на суміжних поверхнях у рівняння (2.3.a), (2.3.b) та виконавши відповідні перетворення, отримуємо:

$$c_1(y, s) = W_{c1}(s)c_{10}(s) - W_{c2}(s)c_{22}(s); \quad (3.3)$$

$$c_{m1}(y, s) = W_{c1}^m(s)c_{10}(s) - W_{c2}^m(s)c_{22}(s), \quad (3.4)$$

де

$$W_{c1} = \frac{\sec h \left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right)}{1 + k_{21} \sqrt{D_{21}} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right) \cdot cth \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2 \right)}; \quad (3.5)$$

$$W_{c2} = \frac{\sec h \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2 \right)}{1 + k_{12} \sqrt{D_{12}} \cdot cth \left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right) \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2 \right)}; \quad (3.6)$$

$$W_{c1}^m = \frac{1}{\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}} \times$$

$$\times \frac{th\left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right) + k_{21} \sqrt{D_{21}} cth\left(\sqrt{\frac{s}{D_2} h_2}\right) \left[1 - \operatorname{sech}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right)\right]}{1 + k_{21} \sqrt{D_{21}} \cdot th\left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right) \cdot cth\left(\sqrt{\frac{s}{D_2} h_2}\right)}; \quad (3.7)$$

$$W_{c2}^m = \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}} \times$$

$$\times \frac{\left(ch\left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right) - 1\right) \cdot \operatorname{sech}\left(\sqrt{\frac{s}{D_2} h_2}\right) \cdot \operatorname{csc}h\left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right)}{1 + k_{12} \sqrt{D_{12}} \cdot cth\left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right) \cdot th\left(\sqrt{\frac{s}{D_2} h_2}\right)}. \quad (3.8)$$

РОЗДІЛ 4. ДОСЛІДЖЕННЯ АСИМПТОТИЧНОГО ПОВЕДІННЯ ПЕРЕДАТОЧНИХ ФУНКЦІЙ

Отримані в межах обох постановок задач передаточні функції описують в області L -відображень динаміку масопереносу у вибраних характерних точках. Однак їх безпосереднє застосування для розв'язання питань аналізу та синтезу вимірювальних пристроїв пов'язане з низкою перешкод при переході до оригіналу, тобто в область реального часу. А тому виникає задача апроксимації отриманих виразів шляхом заміни їх наближеними співвідношеннями, які мають бути простими за формою, допускати зворотний перехід до оригіналу переважно за допомогою наявних таблиць, враховуючи водночас усі істотні властивості точних формул.

Скористаємося для цього методикою [3], що базується на дослідженні асимптотичної поведінки передаточних функцій у вибраній групі точок $\{s_0\}$. Вважають, що точна функція $W(s)$ при $s \rightarrow s_0$ може бути представлена асимптотичною функцією $W^a(s)$, якщо має місце співвідношення:

$$\lim_{s \rightarrow s_0} \frac{W(s)}{W^a(s)} = 1.$$

У нашому випадку в якості точок s_0 достатньо взяти точки, що відповідають початковим ($s \rightarrow \infty$) та кінцевим ($s \rightarrow 0$) моментам часу.

Саму асимптотичну функцію звичайно отримують або розкладаючи оригінальний вираз у степеневі ряди і представляючи її у вигляді відношення поліномів P_n, P_m у різних степенях, або наближеним інтегруванням оригінальної системи рівнянь при неув'язці деякого профілю концентрації ТД в об'єкті [3]. Ми скористаємося першою методикою, як найбільш зручною для практичного використання та, водночас, такою, що дає змогу отримувати розв'язок із заданою наперед точністю простими варіаціями кількості залишених членів ряду. Відповідно до неї передаточні функції необхідно представити у вигляді відношення двох функцій, кожна з яких не має особливостей (поліусів) і може бути розкладена у степеневий ряд.

Близьким до усталених значень вихідних величин моментам часу, згідно з теоремою про кінцеве значення, відповідають малі значення змінної s (моменти s -часу). Тоді для передаточних функцій $W_{c_1}^{1m}(s)$ та $W_{\phi_1}^{1m}(s)$ після нескладних перетворень отримаємо:

$$W_{c_1}^{1m}(s) = \frac{c_{1m}(s)}{c_{10}(s)} = \frac{1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(\alpha_1 h_1)^{2n}}{(2n-1)!}}{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1 h_1)^{2k}}{(2k)!}} = \frac{1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)!} \left(\frac{h_1^2}{D_1} s \right)^n}{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \left(\frac{h_1^2}{D_1} s \right)^k}; \quad (4.1)$$

$$W_{\phi_1}^{1m}(s) = \frac{c_{1m}(s)}{\phi_1(s)} = \frac{1}{h_1 s} \cdot \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \left(\frac{h_1^2}{D_1} s \right)^n}{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \left(\frac{h_1^2}{D_1} s \right)^k} = \frac{1}{h_1} \cdot \frac{\sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{h_1^2}{D_1} \right)^n \frac{s^{n-1}}{(2n)!}}{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(2k)!} \left(\frac{h_1^2}{D_1} s \right)^k}. \quad (4.2)$$

При спрощенні отриманих виразів завжди необхідно перевіряти виконання умов існування оригіналів відображень — показник степеня чисельника має бути меншим або дорівнювати показнику степеня знаменника. Застосовуючи правило Лопіталя, легко показати, що, відповідно до наведеного вище означення, отримані співвідношення дійсно є асимптотичними функціями [11]. Таким чином, навколо точки $s_0 = 0$ співвідношення (4.1), (4.2) описують динаміку системи, як і точні передаточні функції.

Враховуючи викладене вище, наведемо відповідні вирази для передаточної функції $W_{c_1}^{1m}(s)$ у «згорненій» формі, обмежившись у розкладах лише членами другого порядку ($m = 2$):

$$W_{c_1}^{1m}(s \rightarrow \infty) = \frac{1 + \frac{1}{6} \cdot \frac{h_1^2}{D_1} s}{\left(1 + \frac{h_1^2}{2,536 D_1} s\right) \cdot \left(1 + \frac{h_1^2}{9,464 D_1} s\right)} \quad (4.3.a)$$

або третього порядку ($m = 3$):

$$W_{c_1}^{1m}(s \rightarrow \infty) = \frac{1 + \frac{1}{6} \cdot \frac{h_1^2}{D_1} s + \frac{1}{24} \cdot \left(\frac{h_1^2}{D_1}\right)^2 s^2}{\left(1 + \frac{h_1^2}{2,798 D_1} s\right) \cdot \left(1 + \frac{h_1^2}{9,443 D_1} s\right) \cdot \left(1 + \frac{h_1^2}{27,251 D_1} s\right)}. \quad (4.3.b)$$

Для виконання оціночних розрахунків, а також за відносно значних градієнтів концентрації, можна обмежитися лише першими двома членами відповідних розкладів:

$$W_{c_1}^{1m}(s \rightarrow \infty) = \frac{1}{1 + \frac{h_1^2}{2D_1} s}.$$

Отримані співвідношення дають змогу звести оригінальну задачу до еквівалентної, із зосередженими параметрами, що відповідає переходу від диференційних рівнянь у частинних похідних до звичайних диференційних рівнянь.

Початковим моментам часу, згідно з теоремою про початкове значення [3], відповідають великі значення змінної s . А тому не можна обмежуватися, як ми це робили вище, кількома членами у розкладах відповідних функцій у ряд. Переходячи в отриманих формулах від гіперболічних функцій до показникових та обчисливши відповідні граничні значення, отримуємо:

$$W_{c_1}^1(s) \approx 2 \exp\left(-\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right);$$

$$W_{c_1}^{1m}(s) \approx \frac{\sqrt{D_1}}{h_1} \frac{1}{\sqrt{s}}; \quad (4.4)$$

$$W_{\phi 1}^1(s) \approx \frac{1}{\sqrt{D_1}} \frac{1}{\sqrt{s}};$$

$$W_{\phi 1}^{1m}(s) \approx \frac{1}{sh_1} \left(2 \exp \left(-\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right) - 1 \right).$$

Як бачимо, у початкові моменти часу поведінку деяких передаточних функцій, а саме $W_{c1}^{1m}(s)$, $W_{\phi 1}^{1m}(s)$, визначають трансцендентними співмножниками виду:

$$\exp \left(-\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right),$$

що вказує на затримку в проходженні відповідного сигналу з постійною часу, яка залежить від параметра $\frac{h_1}{\sqrt{D_1}}$. Інтерпретуючи такі співмножники з позицій системно-структурного аналізу [4] як окрему ланку структурної моделі масопереносу, можна знайти відповідну йому перехідну функцію [5]:

$$h(t) = \operatorname{erfc} \left(\frac{h_i}{2\sqrt{D_i t}} \right), \quad (4.5)$$

тобто перехідна функція являє собою функцію похибок.

Графік такої залежності показано на рис. 4.3. Якщо обмежитись випадком малих проміжків часу, вираз (4.5) можна розкласти в ряд [6]. Обмежуючись першим членом ряду та виконавши відповідні алгебраїчні викладки, отримаємо:

$$h(t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{D_i t}}{h_i} \cdot \exp \left(\frac{h_i^2}{4D_i t} \right).$$

Що ж до передаточних функцій $W_{c1}^{1m}(s)$, $W_{\phi 1}^{1m}(s)$, то їх поведінка у початкові моменти часу апроксимується трансцендентною напівінтегруючою ланкою $S^{-1/2}$.

РОЗДІЛ 5. ПОСТІЙНІ ЧАСУ РЕЛАКСАЦІЇ ІНФОРМАТИВНОГО ПАРАМЕТРА ВИМІРЮВАНОВОГО СИГНАЛУ ПРИ МАСОПЕРЕНОСІ У БІНАРНІЙ СИСТЕМІ ПЛОСКИХ ПЛАСТИН

Аналогічно проведеному вище аналізу можна отримати зручні для нього співвідношення для передаточних функцій, що описують динаміку інформативного параметра вихідного сигналу

у бінарній системі плоских пластин у віддалені від початкового моменту часу. Представимо передаточну функцію $W_{c1}(s)$ (3.4) через найпростіші гіперболічні функції — синус та косинус:

$$W_{c1} = \frac{\sec h \left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right)}{1 + k_{21} \sqrt{D_{21}} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right) \cdot cth \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2 \right)} =$$

$$= \frac{sh \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2 \right)}{sh \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2 \right) \cdot ch \left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right) + k_{21} \sqrt{D_{21}} \cdot sh \left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right) \cdot ch \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2 \right)}$$

Замінюючи добутки трансцендентних функцій відповідними сумами та розкладаючи отримані співвідношення у степеневі ряди, обмежуючись членами другого порядку малості, отримуємо після алгебраїчних перетворень:

$$W_{c1} \approx \frac{1 + \frac{1}{6} \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2 \right)^2}{(1 + \alpha) \left[1 + \frac{1 + 3\alpha}{6(1 + \alpha)} \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2 \right)^2 + \frac{3 + \alpha}{6(1 + \alpha)} \left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1 \right)^2 \right]} =$$

$$= \frac{1}{1 + \alpha} \cdot \frac{1 + \frac{1}{6} \frac{h_2^2}{D_2} s}{(3 + \alpha) \frac{h_1^2}{D_1} + (1 + 3\alpha) \frac{h_2^2}{D_2} s} = k_{c1} \frac{1 + T_{2c1} s}{1 + T_{1c1} s},$$

$$1 + \frac{1 + \frac{1}{6} \frac{h_2^2}{D_2} s}{6(1 + \alpha)}$$

де

$$\alpha = k_{21} \sqrt{D_{21}} \frac{\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1}{\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2} = \frac{h_1}{h_2} \frac{k_2}{k_1} \frac{D_2}{D_1};$$

$$k_{c1} = \frac{1}{1+\alpha};$$

$$T_{1c1} = \frac{(3+\alpha)\frac{h_1^2}{D_1} + (1+3\alpha)\frac{h_2^2}{D_2}}{6(1+\alpha)};$$

$$T_{2c1} = \frac{h_2^2}{6D_2}.$$

Представимо передаточну функцію $W_{C2}(s)$ (3.4) через найпростіші гіперболічні функції — синус та косинус:

$$W_{c2} = \frac{\operatorname{sech}\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}}h_2\right)}{1+k_{12}\sqrt{D_{12}} \cdot \operatorname{cth}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}}h_1\right) \cdot \operatorname{th}\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}}h_2\right)} =$$

$$= \frac{\operatorname{sech}\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}}h_2\right)}{\operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}}h_1\right) \cdot \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}}h_2\right) + k_{12}\sqrt{D_{12}} \cdot \operatorname{sh}\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}}h_2\right) \cdot \operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}}h_1\right)}.$$

Замінюючи добутки трансцендентних функцій відповідними сумами та розкладаючи отримані співвідношення у степеневі ряди, обмежуючись членами другого порядку малості, отримаємо після алгебраїчних перетворень:

$$W_{c2} \approx \frac{1 + \frac{1}{6}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}}h_1\right)^2}{(1+\beta)\left[1 + \frac{1+3\beta}{6(1+\beta)}\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}}h_2\right)^2 + \frac{3+\beta}{6(1+\beta)}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}}h_1\right)^2\right]} =$$

$$= \frac{1}{1+\beta} \cdot \frac{1 + \frac{1}{6}\frac{h_1^2}{D_1}s}{(1+3\beta)\frac{h_1^2}{D_1} + (3+\beta)\frac{h_2^2}{D_2}} = k_{c2} \frac{1+T_{2c2}s}{1+T_{1c2}s},$$

$$1 + \frac{h_1^2}{6(1+\beta)}s$$

де

$$\beta = k_{12} \sqrt{D_{12}} \frac{\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2}{\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1} = \frac{h_2}{h_1} \cdot \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{D_1}{D_2};$$

$$k_{c2} = \frac{1}{1 + \beta};$$

$$T_{1c2} = \frac{(1 + 3\beta) \frac{h_1^2}{D_1} + (3 + \beta) \frac{h_2^2}{D_2}}{6(1 + \beta)};$$

$$T_{2c2} = \frac{h_1^2}{6D_1}.$$

Представимо передаточну функцію $W_{c1}^m(s)$ (3.4) через найпростіші гіперболічні функції — синус та косинус:

$$W_{c1}^m =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1} \cdot \frac{th\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right) + k_{21} \sqrt{D_{21}} cth\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right) \left[1 - \operatorname{sech}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right)\right]}{1 + k_{21} \sqrt{D_{21}} \cdot th\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right) \cdot cth\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right)}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1} \times$$

$$\times \frac{sh\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right) \cdot ch\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right) + k_{21} \sqrt{D_{21}} \cdot ch\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right) \left[ch\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right) - 1\right]}{sh\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right) \cdot ch\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right) + k_{21} \sqrt{D_{21}} \cdot sh\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right) \cdot ch\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right)}.$$

Замінюючи добутки трансцендентних функцій відповідними сумами та розкладаючи отримані співвідношення у степеневі

ряди, обмежуючись членами другого порядку малості, отримаємо після алгебраїчних перетворень:

$$\begin{aligned}
 W_{c1}^m &\approx \frac{1 + \frac{\alpha}{2}}{1 + \alpha} \cdot \frac{1 + \frac{1}{2\left(1 + \frac{2}{\alpha}\right)} \cdot \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right)^2}{1 + \frac{1 + 3\alpha}{6(1 + \alpha)} \left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right)^2 + \frac{3 + \alpha}{6(1 + \alpha)} \left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right)^2} = \\
 &= \frac{1 + \frac{\alpha}{2}}{1 + \alpha} \cdot \frac{1 + \frac{1}{2\left(1 + \frac{2}{\alpha}\right)} \cdot \frac{h_2^2}{D_2} s}{\frac{(3 + \alpha) \frac{h_1^2}{D_1} + (1 + 3\alpha) \frac{h_2^2}{D_2}}{1 + \frac{h_2^2}{6(1 + \alpha)} s}} = k_{m1} \frac{1 + T_{2m1}s}{1 + T_{1m1}s},
 \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
 \alpha &= \frac{h_1}{h_2} \frac{k_2}{k_1} \frac{D_2}{D_1}; \\
 k_{m1} &= \frac{1 + \frac{\alpha}{2}}{1 + \alpha}; \\
 T_{1m1} &= \frac{(3 + \alpha) \frac{h_1^2}{D_1} + (1 + 3\alpha) \frac{h_2^2}{D_2}}{6(1 + \alpha)}; \\
 T_{2m1} &= \frac{h_2^2}{2\left(1 + \frac{2}{\alpha}\right) D_2}.
 \end{aligned}$$

Представимо передаточну функцію $W_{c2}^m(s)$ (3.4) через найпростіші гіперболічні функції — синус та косинус:

$$W_{c2}^m = \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{1}{\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1} \cdot \frac{\left(\operatorname{ch}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right) - 1\right) \cdot \operatorname{sech}\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right) \cdot \operatorname{csch}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right)}{1 + k_{12} \sqrt{D_{12}} \cdot \operatorname{cth}\left(\sqrt{\frac{s}{D_1}} h_1\right) \cdot \operatorname{th}\left(\sqrt{\frac{s}{D_2}} h_2\right)} =$$

$$= \frac{k_1}{k_2} \times \frac{1}{\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}} \times$$

$$\times \frac{ch\left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right) - 1}{sh\left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right) \cdot ch\left(\sqrt{\frac{s}{D_2} h_2}\right) + k_{12} \sqrt{D_{12}} \cdot sh\left(\sqrt{\frac{s}{D_2} h_2}\right) \cdot ch\left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right)}.$$

Замінюючи добутки трансцендентних функцій відповідними сумами та розкладаючи отримані співвідношення у степеневі ряди, обмежуючись членами другого порядку малості, отримуємо після алгебраїчних перетворень:

$$W_{c2}^m \approx \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{1}{2(1+\beta)} \cdot \frac{1 + \frac{1}{24} \left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right)^2}{1 + \frac{1+3\beta}{6(1+\beta)} \left(\sqrt{\frac{s}{D_2} h_2}\right)^2 + \frac{3+\beta}{6(1+\beta)} \left(\sqrt{\frac{s}{D_1} h_1}\right)^2} =$$

$$= \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{1}{2(1+\beta)} \cdot \frac{1 + \frac{h_1^2}{24D_1} s}{(1+3\beta) \frac{h_1^2}{D_1} + (3+\beta) \frac{h_2^2}{D_2} s} = k_{m2} \frac{1 + T_{2m2} s}{1 + T_{1m2} s},$$

де

$$\beta = \frac{h_2}{h_1} \cdot \frac{k_1}{k_2} \cdot \frac{D_1}{D_2};$$

$$k_{m2} = \frac{1}{2(1+\beta)} \cdot \frac{k_1}{k_2};$$

$$T_{1m2} = \frac{(1+3\beta)\frac{h_1^2}{D_1} + (3+\beta)\frac{h_2^2}{D_2}}{6(1+\beta)};$$

$$T_{2m2} = \frac{h_1^2}{24 \cdot D_1}.$$

Таким чином, у бінарній системі плоских пластин параметри, що характеризують темп релаксації інформативного параметра вихідного сигналу в кожному з елементів структури, залежать не лише від власне його електрофізичних характеристик, але й від електрофізичних характеристик сусіднього з ним елементу.

Глава VIII

СИСТЕМНО-СТРУКТУРНИЙ АНАЛІЗ ЛІНІЇ ВИМІРЮВАЛЬНОГО ПЕРЕТВОРЕННЯ ІНФОРМАТИВНОГО ПАРАМЕТРА ВХІДНОГО СИГНАЛУ

Розділ 1. ХЕМОСОРБЦІЯ ПРОСТИХ ІДЕАЛЬНИХ ГАЗІВ

Неважко показати [1,4], що динаміка взаємодії поверхні напівпровідника з газовою фазою у першому наближенні може бути описана системою рівнянь:

$$\begin{aligned} \dot{N}_{\alpha j} &= f_{\alpha j}(N_{\alpha j}, P_{\alpha}, u_S); \\ \alpha &= \overline{1, w}; \end{aligned} \quad (1.a)$$

$$n_{\alpha}^{-} \leq j \leq n_{\alpha}^{+};$$

$$Q_{SS} + Q_{SC} = Q_{FE}, \quad (1.b)$$

де

$$Q_{SS} = q \sum_{\alpha=1}^w \sum_{j=n_{\alpha}^{-}}^{n_{\alpha}^{+}} j N_{\alpha j};$$

$$Q_{SC} = \chi \beta^{-1} l_D^{-1} F(u_S, u_B);$$

$$F(u_S, u_B) = \text{sign}(u'_S) \cdot \{\varphi(u_S, u_B)\}^{1/2};$$

$$\varphi(u_S, u_B) = 2 [ch(u_B - u_S) - ch(u_B) + sh(u_B)u_S];$$

$$\beta = \frac{q}{kT};$$

$$l_D = \left(\frac{\chi kT}{2q^2 n_i} \right)^{1/2};$$

$$u_B = \frac{E_F - E_i}{kT};$$

$$Q_{FE} = CV;$$

$$C = \frac{1}{\frac{1}{C_D} + \frac{1}{C_{SS} + C_{\text{ОПЗ}}}};$$

$$C_{SS} = \frac{\chi_D}{d};$$

$$C_{SC} = -\beta \frac{\partial Q_{SS}}{\partial u_S};$$

$$C_{\text{ОПЗ}} = \frac{\chi_D}{l_{\text{ОПЗ}}},$$

причому $l_{\text{ОПЗ}}$ — ширина області просторового заряду;

Q_{SS} — поверхневий заряд;

Q_{SC} — заряд ОПЗ;

u_S — обернений безрозмірний поверхневий потенціал;

p_α — парціальний тиск молекул газу α -сорту.

Лінеаризована відносно робочої точки система рівнянь (1) має вигляд:

$$\Delta \dot{N}_{\alpha j} = \frac{\partial f_{\alpha j}}{\partial N} \Delta N + \frac{\partial f_{\alpha j}}{\partial u_S} \Delta u_S + \frac{\partial f_{\alpha j}}{\partial p} \Delta p;$$

$$\alpha = 1, w;$$

$$j \in [n_\alpha^-, n_\alpha^+];$$

$$q \sum_{\alpha=1}^w \sum_{j=n_\alpha^-}^{n_\alpha^+} j \Delta N_{\alpha j} + \frac{\partial Q_{SC}}{\partial u_S} \Delta u_S = C \Delta V,$$

де

$$\frac{\partial Q_{SC}}{\partial u_S} = \chi \beta^{-1} l_D^{-1} \frac{\partial F(u_S, u_B)}{\partial u_S};$$

$$\frac{\partial F(u_S, u_B)}{\partial u_S} = \frac{-sh(u_B - u_S) + sh(u_B)}{F(u_S, u_B)}.$$

Розв'язуючи рівняння (2.б) відносно Δu_S , отримаємо:

$$\Delta u_S = k_{US} \sum_{\alpha=1}^w \sum_{j=n_\alpha^-}^{n_\alpha^+} j \Delta N_{\alpha j} + k_V \Delta V,$$

де введено такі позначення:

$$k_{US} = \frac{q \beta l_D}{\chi} \cdot \frac{F(u_S, u_B)}{-sh(u_B - u_S) + sh(u_B)} = \frac{q \beta l_D}{2\chi} \cdot \frac{F(u_S, u_B)}{sh\left(\frac{u_S}{2}\right) ch\left(u_B - \frac{u_S}{2}\right)};$$

$$k_V = \frac{C \beta l_D}{\chi} \cdot \frac{F(u_S, u_B)}{-sh(u_B - u_S) + sh(u_B)} = \frac{C \beta l_D}{2\chi} \cdot \frac{F(u_S, u_B)}{sh\left(\frac{u_S}{2}\right) ch\left(u_B - \frac{u_S}{2}\right)}.$$

1.1. Хемосорбція акцепторного газу на чистій поверхні напівпровідника

Система рівнянь (1.а) у цьому випадку має вигляд:

$$\begin{aligned}\dot{a}^0 &= k^A(N^* - a^0 - a^-)p - k^D a^0 - k^e a^0 + g^e a^-; \\ \dot{a}^- &= k^e a^0 - g^e a^-, \end{aligned}$$

де a^0, a^- — поверхневі концентрації акцепторного газу в нейтральному та іонізованому станах відповідно;

N^* — загальна кількість адсорбційних центрів;

k_α^A, k_α^D — константи адсорбції та десорбції;

k^e, g^e — ймовірності екстракції та інжекції електрону поверхневими центрами.

Відповідна система лінійного наближення дається співвідношеннями:

$$\begin{aligned}\Delta \dot{a}^0 &= k^A(N^* - a^0 - a^-) \Delta p - k^A p \Delta a^0 - k^A p \Delta a^- - \\ &\quad - k^D \Delta a^0 - k^e \Delta a^0 + g^e \Delta a^- + k^e a^0 \Delta u_S; \\ \Delta \dot{a}^- &= k^e \Delta a^0 - g^e \Delta a^- - k^e a^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US} \Delta a^- \end{aligned} \quad (3)$$

або, для першого рівняння системи:

$$\Delta \dot{a}^0 = c_p \Delta p - (k^A p + k^e + k^D) \Delta a^0 - (k^A p - g^e) \Delta a^- + k^e a^0 \Delta u.$$

Якщо ввести позначення:

$$\begin{aligned}c_p &= k^A(N^* - a^0 - a^-); \\ c_{ou} &= k^e a^0; \\ c_u &= k_{US}; \\ c_{a0} &= k^A p + k^e + k^D; \\ c_{a1} &= k^A p - g^e, \end{aligned}$$

то можна записати:

$$\begin{aligned}c_{a0} \Delta a^0 + \Delta \dot{a}^0 &= c_p \Delta p - c_{a1} \Delta a^- + c_{ou} \Delta u_S; \\ g^e \Delta a^- + \Delta \dot{a}^- &= k^e \Delta a^0 - k^e a^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= c_u \Delta a^-. \end{aligned}$$

Застосовуючи перетворення Лапласа до відповідних лінійних диференціальних рівнянь, отримуємо:

$$\begin{aligned}c_{a0}(1 + T_{a0}s)\Delta a^0 &= c_p\Delta p - c_{a1}\Delta a^- + c_{0u}\Delta u_S; \\g^e(1 + T_{a1}s)\Delta a^- &= k^e\Delta a^0 - c_{0u}\Delta u_S; \\ \Delta u_S &= c_u\Delta a^-\end{aligned}$$

або:

$$\begin{aligned}\Delta a^0 &= W_{a0}(c_p\Delta p - c_{a1}\Delta a^- + c_{0u}\Delta u_S); \\ \Delta a^- &= W_{a1}(k^e\Delta a^0 - c_{0u}\Delta u_S); \\ \Delta u_S &= c_u\Delta a^-, \end{aligned} \tag{4}$$

де

$$\begin{aligned}W_{a0} &= \frac{T_{a0}}{1 + T_{a0}s}; \\ W_{a1} &= \frac{T_{a1}}{1 + T_{a1}s}; \\ T_{a0} &= \frac{1}{c_{a0}}; \\ T_{a1} &= \frac{1}{g^e}.\end{aligned}$$

Відповідну топологічну модель, що відображає лінію вимірювального перетворення парціального тиску акцепторного газу в інформативний параметр вихідного сигналу чутливого елемента напівпровідникового сенсора, показано на рис. 8.1.

Виконавши відповідні перетворення, можна отримати еквівалентну передаточну функцію:

$$\begin{aligned}\Delta u_S &= W_A(s)\Delta p; \\ W_A(s) &= k \frac{1}{1 + T_1s + T_2s^2},\end{aligned}$$

що відповідає структурній схемі згідно зі співвідношенням (4) та рис. 8.1. Тут:

$$k = \frac{c_p k_{US}}{c_{a1}} \cdot \frac{1}{1 + \frac{g^e}{k^e} \frac{c_{a0}}{c_{a1}} + k_{US} \frac{c_{0u}}{c_{a1}} \left(\frac{c_{a0}}{k^e} - 1 \right)};$$

$$T_1 = \frac{T_{a0} + T_{a1} + c_u c_{0u} T_{a0} T_{a1}}{k_1};$$

$$T_2 = \frac{T_{a0} T_{a1}}{k_1};$$

$$k_1 = 1 + c_u c_{0u} T_{a1} (1 - k^e T_{a0}) + c_{a1} k^e T_{a0} T_{a1}$$

або:

$$T_1 = \frac{g^e + c_{a0} + c_u c_{0u}}{k_0};$$

$$T_2 = \frac{1}{k_0};$$

$$k_0 = g^e c_{a0} + k_{US} c_{0u} k^e \left(\frac{c_{a0}}{k^e} - 1 \right) + k^e c_{a1}.$$

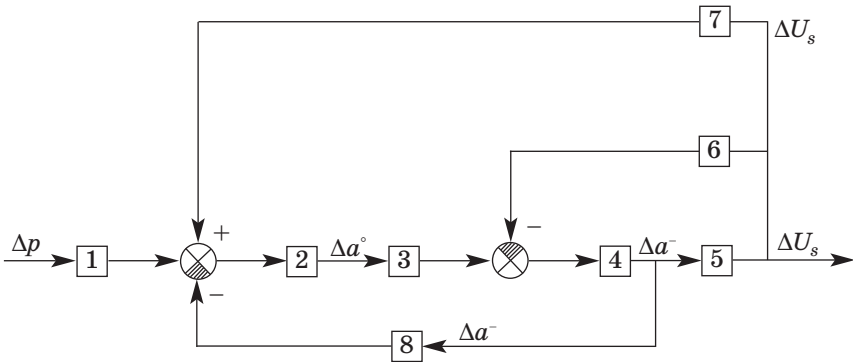


Рис. 8.1. Структурна схема лінії вимірювального перетворення на поверхні ЧЕ напівпровідникового сенсора газу при хемосорбції акцептора. Цифрами позначені відповідні передаточні функції: $W_1 = C_p$, $W_2 = W_{a0}$, $W_3 = k^e$, $W_4 = W_{a1}$, $W_5 = k_{us}$, $W_6 = k^e a^0$, $W_7 = k^e a^0$

Таким чином, процесу вимірювального перетворення на поверхні чутливого елементу напівпровідникового сенсора газу при адсорбції акцепторного газу відповідає аперіодична ланка другого порядку. Знаки у постійних часу та в коефіцієнті перетворення визначаються типом провідності адсорбенту (коефіцієнт c_u) та співвідношенням швидкостей адсорбції та інжекції носіїв заряду поверхневими станами (коефіцієнт c_{au}). А тому на поверхні адсорбенту p -типу слід очікувати типово нестійких перехідних процесів відгуку сенсора на хемосорбцію акцепторного газу.

Завершуючи розгляд цієї постановки задачі, запишемо систему лінійного наближення у формі, традиційній для сучасної теорії оптимального управління — у нормальній формі Коші:

$$\begin{aligned}\dot{x}_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2; \\ \dot{x}_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2; \\ y &= cx_2,\end{aligned}\tag{5}$$

де

$$\begin{aligned}x_1 &= \Delta a^0; x_2 = \Delta a^-; u = \Delta p; y = \Delta u_S; \\ a_{11} &= -c_{a0}; a_{12} = -(c_{a1} - c_{0u}c_u); a_{21} = k^e; \\ a_{22} &= -(g^e + c_{0u}c_u); \\ c &= c_u = k_{US}; b = c_p = k^A(N^* - a^0 - a^-).\end{aligned}$$

Головний визначник відповідної однорідної системи:

$$\begin{aligned}\Delta &= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = \\ &= c_{a0}(g^e + c_{0u}c_u) + (c_{a1} - c_{0u}c_u)k^e = \\ &= (k^A p + k^e + k^D)(g^e + c_{0u}c_u) + (k^A p - g^e - c_{0u}c_u)k^e = \\ &= (g^e + c_{0u}c_u)(k^D + k^A p) + k^e k^A p.\end{aligned}$$

1.2. Хемосорбція донорного газу на чистій поверхні напівпровідника

Система рівнянь (1.а) у цьому випадку має вигляд:

$$\begin{aligned}d^0 &= k^A(N^* - d^0 - d^+)p - k^D d^0 - k^e d^0 + g^e d^+; \\ d^+ &= k^h d^0 - g^h d^+,\end{aligned}$$

де d^0, d^+ — поверхневі концентрації донорного газу в нейтральному та іонізованому станах відповідно;

N^* — загальна кількість адсорбційних центрів;

k^A, k^D — константи адсорбції та десорбції;

k^h, g^h — ймовірності екстракції та інжекції дірки поверхневими центрами.

Відповідна система лінійного наближення дається співвідношеннями:

$$\begin{aligned}\Delta d^0 &= k^A(N^* - d^0 - d^+) \Delta p - (k^A p + k^D + k^h) \Delta d^0 - \\ &\quad - (k^A p - g^h) \Delta d^+ x \Delta d^+ - k^h d^0 \Delta u_S; \\ \Delta d^- &= k^h \Delta d^0 - g^h \Delta d^+ + k^h d^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= -k_{US} \Delta d^+.\end{aligned}$$

Якщо ввести позначення:

$$\begin{aligned}c_p &= k^A(N^* - d^0 - d^+); \\ c_{ou} &= k^e d^0; \\ c_u &= k_{US}; \\ c_{d0} &= k^A p + k^h + k^D; \\ c_{d1} &= k^A p - g^h,\end{aligned}$$

то можна записати:

$$\begin{aligned}c_{d0} \Delta d^0 + \Delta d^0 &= c_p \Delta p - c_{d1} \Delta d^+ - c_{ou} \Delta u_S; \\ g^e \Delta d^+ + \Delta d^+ &= k^h \Delta d^0 + k^h d^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= -c_u \Delta d^+.\end{aligned}$$

Застосовуючи перетворення Лапласа до відповідних лінійних диференціальних рівнянь, отримаємо:

$$\begin{aligned}c_{d0}(1 + T_{d0}s) \Delta d^0 &= c_p \Delta p - c_{d1} \Delta d^+ + c_{ou} \Delta u_S; \\ g^h(1 + T_{d1}s) \Delta d^+ &= k^h \Delta d^0 - c_{ou} \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= -c_u \Delta d^+.\end{aligned}$$

або:

$$\begin{aligned}\Delta d^0 &= W_{d0}(c_p \Delta p - c_{d1} \Delta d^+ + c_{ou} \Delta u_S); \\ \Delta d^+ &= W_{d1}(k^h \Delta d^0 + c_{ou} \Delta u_S); \\ \Delta u_S &= -c_u \Delta d^+, \tag{6}\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}W_{d0} &= \frac{T_{d0}}{1 + T_{d0}s}; \\ W_{d1} &= \frac{T_{d1}}{1 + T_{d1}s};\end{aligned}$$

$$T_{d0} = \frac{1}{c_{d0}};$$

$$T_{d1} = \frac{1}{g^h}.$$

Відповідну топологічну модель, що відображає лінію вимірювального перетворення парціального тиску акцепторного газу в інформативний параметр вихідного сигналу чутливого елемента напівпровідникового сенсора, показано на рис. 8.2.

Виконавши відповідні перетворення, можна отримати еквівалентну передаточну функцію:

$$\Delta u_S = W_D(s) \Delta p,$$

$$W_D(s) = k \frac{1}{1 + T_1 s + T_2 s^2},$$

що відповідає структурній схемі згідно зі співвідношенням (6) та рис. 8.2. Тут:

$$k = \frac{\frac{c_p k_{US}}{c_{d1}}}{1 + \frac{g^h c_{d0}}{k^h c_{d1}} + k_{US} \frac{c_{0u}}{c_{d1}} \left(\frac{c_{d0}}{k^h} - 1 \right)};$$

$$T_1 = \frac{T_{d0} + T_{d1} + c_u c_{0u} T_{d0} T_{d1}}{k_1};$$

$$T_2 = \frac{T_{d0} T_{d1}}{k_1};$$

$$k_1 = 1 + c_u c_{0u} T_{d1} (1 - k^h T_{d0}) + c_{d1} k^h T_{d0} T_{d1}$$

або:

$$T_1 = \frac{g^h + c_{d0} + c_u c_{0u}}{k_0};$$

$$T_2 = \frac{1}{k_0};$$

$$k_0 = g^h c_{d0} + k_{US} c_{0u} k^h \left(\frac{c_{d0}}{k^h} - 1 \right) + k^h c_{d1}.$$

Таким чином, процесу вимірювального перетворення на поверхні чутливого елемента напівпровідникового сенсора газу

при адсорбції донорного газу відповідає аперіодична ланка другого порядку. Як показує аналіз отриманих співвідношень, на поверхні адсорбенту n -типу слід очікувати типово нестійких перехідних процесів відгуку сенсора при зміні парціального тиску донорного газу.

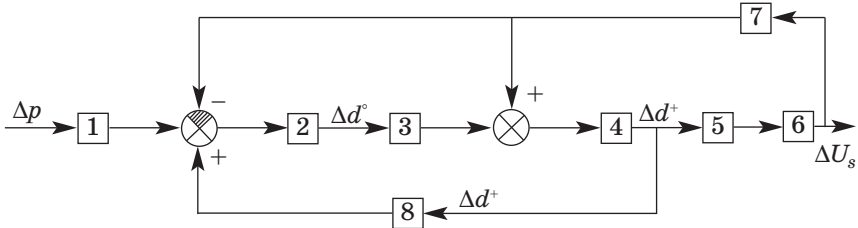


Рис. 8.2. Структурна схема лінії вимірювального перетворення на поверхні ЧЕ напівпровідникового сенсора газу при хемосорбції донорного адсорбату. Цифрами позначені відповідні передаточні функції:

$$W_1 = C_p, W_2 = W_{od}, W_3 = k^h, W_4 = W_{1\alpha}, W_5 = C_u, \\ W_6 = -1, W_7 = C_{ou}, W_8 = C_{1\alpha}$$

Завершуючи розгляд цієї постановки задачі, запишемо систему лінійного наближення в нормальній формі Коші:

$$\dot{x}_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2;$$

$$\dot{x}_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2;$$

$$y = cx_2,$$

де

$$x_1 = \Delta d^0;$$

$$x_2 = \Delta d^+;$$

$$u = \Delta p;$$

$$y = \Delta u_s;$$

$$a_{11} = -c_{d0};$$

$$a_{12} = -(c_{d1} - c_{0u}c_u);$$

$$a_{21} = k^h;$$

$$a_{22} = -(g^h + c_{0u}c_u);$$

$$c = c_u = k_{US};$$

$$b = c_p = k^A(N * -d^0 - d^+).$$

Головний визначник відповідної однорідної системи:

$$\begin{aligned}\Delta &= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = \\ &= c_{d0}(g^h + c_{0u}c_u) + (c_{d1} - c_{0u}c_u)k^h = \\ &= (k^A p + k^h + k^D)(g^h + c_{0u}c_u) + (k^A p - g^h - c_{0u}c_u)k^h = \\ &= (g^h + c_{0u}c_u)(k^D + k^A p) + k^h k^A p.\end{aligned}$$

1.3. Хемосорбція амфотерного газу на чистій поверхні напівпровідника

Система рівнянь (1.а) у цьому випадку має вигляд:

$$\begin{aligned}\dot{a}^0 &= k^A(N^* - a^0 - a^- - a^+)p - k^D a^0 - k^e a^0 + g^e a^- - k^h a^0 + g^h a^+; \\ \dot{a}^- &= k^e a^0 - g^e a^-; \\ \dot{a}^+ &= k^h a^0 - g^h a^+,\end{aligned}$$

де a^0, a^-, a^+ — поверхневі концентрації амфотерного газу в нейтральному та іонізованому станах, відповідно;

N^* — загальна кількість адсорбційних центрів;

k_α^A, k_α^D — константи адсорбції та десорбції;

k^e, g^e — ймовірності екстракції та інжекції електрону поверхневими центрами;

k^h, g^h — ймовірності екстракції та інжекції дірки поверхневими центрами.

Відповідна система лінійного наближення дається співвідношеннями:

$$\begin{aligned}\Delta \dot{a}^0 &= k^A(N^* - a^0 - a^-)\Delta p - k^A p \Delta a^0 - k^A p \Delta a^- - k^D \Delta a^0 - \\ &- k^e \Delta a^0 + g^e \Delta a^- - k^h \Delta a^0 + g^h \Delta a^+ + k^e a^0 \Delta u_S - k^h a^0 \Delta u_S; \\ \Delta \dot{a}^- &= k^e \Delta a^0 - g^e \Delta a^- - k^e a^0 \Delta u_S; \\ \Delta \dot{a}^+ &= k^h \Delta a^0 - g^h \Delta a^+ + k^h a^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta a^+).\end{aligned}$$

Якщо ввести позначення:

$$\begin{aligned}c_p &= k^A(N^* - a^0 - a^- - a^+); \\ c_{0u} &= (k^e - k^h)a^0; \\ c_u &= k_{US};\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
c_{a0} &= k^A p + k^D + k^e + k^h; \\
c_{a-} &= k^A p - g^e; \\
c_{a+} &= k^A p - g^h,
\end{aligned}$$

ТО МОЖНА ЗАПИСАТИ:

$$\begin{aligned}
c_{a0}\Delta a^0 + \Delta \dot{a}^0 &= c_p \Delta p - c_{a-} \Delta a^- - c_{a+} \Delta a^+ + c_{0u} \Delta u_S; \\
g^e \Delta a^- + \Delta \dot{a}^- &= k^e \Delta a^0 - k^e a^0 \Delta u_S; \\
g^h \Delta a^+ + \Delta \dot{a}^+ &= k^h \Delta a^0 + k^h a^0 \Delta u_S; \\
\Delta u_S &= c_u (\Delta a^- - \Delta a^+).
\end{aligned} \tag{7}$$

Застосовуючи перетворення Лапласа до відповідних лінійних диференційних рівнянь, отримаємо:

$$\begin{aligned}
c_{a0}(1 + T_{a0}s)\Delta a^0 &= c_p \Delta p - c_{a-} \Delta a^- - c_{a+} \Delta a^+ + c_{0u} \Delta u_S; \\
g^e(1 + T_{a-}s)\Delta a^- &= k^e \Delta a^0 - k^e a^0 \Delta u_S; \\
g^h(1 + T_{a+}s)\Delta a^+ &= k^h \Delta a^0 + k^h a^0 \Delta u_S; \\
\Delta u_S &= c_u (\Delta a^- - \Delta a^+)
\end{aligned} \tag{8}$$

або:

$$\begin{aligned}
\Delta a^0 &= W_{a0}(c_p \Delta p - c_{a-} \Delta a^- - c_{a+} \Delta a^+ + c_{0u} \Delta u_S); \\
\Delta a^- &= W_{a1}(k^e \Delta a^0 - k^e a^0 \Delta u_S); \\
\Delta a^+ &= W_{a1}(k^h \Delta a^0 + k^h a^0 \Delta u_S); \\
\Delta u_S &= c_u (\Delta a^- - \Delta a^+),
\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
W_{a0} &= \frac{T_{a0}}{1 + T_{a0}s}; \\
W_{a-} &= \frac{T_{a-}}{1 + T_{a-}s}; \\
W_{a+} &= \frac{T_{a+}}{1 + T_{a+}s}; \\
T_{a0} &= \frac{1}{c_{a0}};
\end{aligned}$$

$$T_{a^-} = \frac{1}{g^e};$$

$$T_{a^+} = \frac{1}{g^h}.$$

Відповідну топологічну модель, що відображає лінію вимірювального перетворення парціального тиску амфотерного газу в інформативний параметр вихідного сигналу чутливого елемента напівпровідникового сенсора, показано на рис. 8.3.

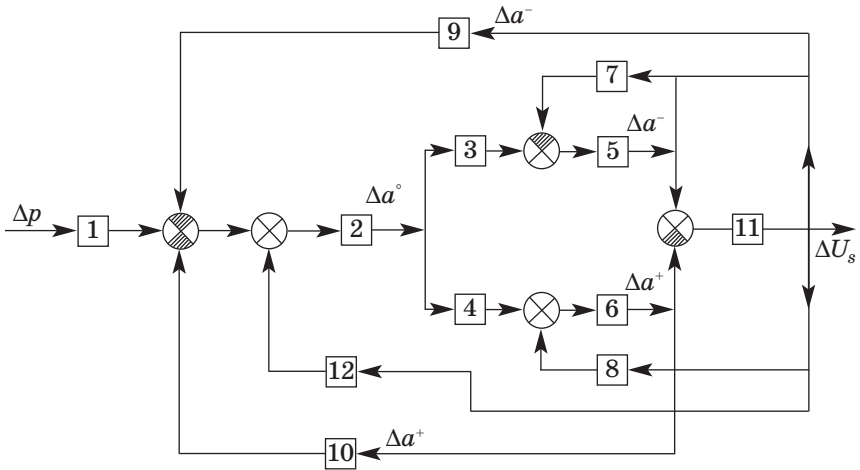


Рис. 8.3. Структурна схема лінії вимірювального перетворення на поверхні ЧЕ напівпровідникового сенсора газу при хемосорбції простого амфотерного адсорбату. Цифрами позначені відповідні передаточні функції: $W_1 = C_p$, $W_2 = W_{od}$, $W_3 = k^h$, $W_4 = W_{1\alpha}$,

$$W_5 = C_u, W_6 = -1, W_7 = C_{ou}, W_8 = C_{1\alpha}$$

Виконавши відповідні перетворення, можна отримати еквівалентну передаточну функцію:

$$\Delta u_s = W_A(s)\Delta p;$$

$$W_F(s) = k \frac{1 + T_1^0 s + T_2^0 s^2}{1 + T_1 s + T_2 s^2 + T_3 s^3 + T_4 s^4};$$

що відповідає структурній схемі згідно зі співвідношеннями (8) та рис. 8.3. Тут:

$$k = c_u c_p T_{a0} \frac{k^e}{a_{10}} \frac{1 - \alpha_x}{1 - \alpha} (1 - \beta);$$

$$\beta = \frac{k^h a_{10} (1 - \alpha_y)}{k^e b_{20} (1 - \alpha_x)};$$

$$T_1 = \frac{T_1(a_1) + T_1(b_2) + \alpha [T(a_2) + T(b_1)]}{1 - \alpha};$$

$$T_2 = \frac{T_2(a_1) + T_1(a_1)T_1(b_2) + T_2(b_2) - \alpha T(a_2)T(b_1)}{1 - \alpha};$$

$$T_3 = \frac{T_2(a_1)T_1(b_2) + T_1(a_1)T_2(b_2)}{1 - \alpha};$$

$$T_4 = \frac{T_2(a_1)T_2(b_2)}{1 - \alpha};$$

$$\alpha = \frac{a_{20} b_{10}}{a_{10} b_{20}};$$

$$T_1^0 = \frac{T_{1x} - \beta T_{1y}}{1 - \beta};$$

$$T_{20}^0 = \frac{T_{2x} - \beta T_{2y}}{1 - \beta};$$

$$T_{1x} = \frac{T_1(b_2) + \alpha_x T(b_1)}{1 - \alpha_x};$$

$$T_{1x} = \frac{T_2(b_2)}{1 - \alpha_x};$$

$$\alpha_x = \frac{k^h b_{10}}{k^e b_{20}};$$

$$T_{1y} = \frac{T_1(a_1) + \alpha_y T(a_2)}{1 - \alpha_y};$$

$$T_{2y} = \frac{T_2(a_1)}{1 - \alpha_y};$$

$$\alpha_y = \frac{k^e a_{20}}{k^h a_{10}};$$

$$T_1(a_1) = \frac{T_{a0} + T_{a-} + c_u k^e a^0 T_{a0} T_{a-}}{a_{10} T_{a-}};$$

$$T_2(a_1) = \frac{T_{a0}}{a_{10}};$$

$$a_{10} = \frac{1}{T_{a-}} + k^e (k_a^- T_{a0} + c_u a^0);$$

$$T(b_1) = \frac{k^e a^0 c_u T_{a0}}{b_{10}};$$

$$b_{10} = k^h (k_a^+ T_{a0} + c_u a^0);$$

$$k_a^+ = c_{a+} + c_u c_{0u};$$

$$T(a_2) = \frac{k^h c_u a^0 T_{a0}}{a_{20}};$$

$$a_{20} = k^h (k_a^- T_{a0} - c_u a^0);$$

$$k_a^- = c_{a-} - c_u c_{0u};$$

$$T_1(b_2) = \frac{T_{a0} + T_{a+} + a^0 c_u k^h T_{a0} T_{a+}}{b_{20} T_{a+}};$$

$$T_2(b_2) = \frac{T_{a0}}{b_{20}};$$

$$b_{20} = \frac{1}{T_{a+}} + k^h (k_a^+ T_{a0} + c_u a^0).$$

Завершуючи розгляд цієї постановки задачі, запишемо систему лінійного наближення в нормальній формі Коші:

$$\dot{x}_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + bu;$$

$$\dot{x}_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3;$$

$$\dot{x}_3 = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3;$$

$$y = c_2x_2 + c_3x_3,$$

де

$$x_1 = \Delta a^0;$$

$$x_2 = \Delta a^-;$$

$$x_3 = \Delta a^+;$$

$$u = \Delta p, \quad y = \Delta u_S;$$

$$\begin{aligned}
a_{11} &= -c_{a0}; \\
a_{12} &= -c_{a^-} + c_{0u}c_u; \\
a_{13} &= -c_{a^+} - c_{0u}c_u; \\
a_{21} &= k^e; \\
a_{22} &= -g^e - c_u c_{u^-}; \\
a_{32} &= c_u c_{u^-}; \\
a_{31} &= k^h; \\
a_{33} &= c_u c_{u^+}; \\
a_{33} &= -g^h - c_u c_{u^+}; \\
c_2 &= c_u = k_{US}; \\
c_3 &= -c_u; \\
b = c_p &= k^A(N^* - a^0 - a^-); \\
c_{u^-} &= k^e a^0; \\
c_{u^+} &= k^h a^0.
\end{aligned}$$

1.4. Хемосорбція акцепторного газу за наявності поверхневої донорної добавки

Система рівнянь (1.а) у цьому випадку має вигляд:

$$\begin{aligned}
\dot{a}^0 &= k^A(N^* - a - d)p - k^D a^0 - k^e a^0 + g^e a^-; \\
\dot{a}^- &= k^e a^0 - g^e a^-; \\
\dot{a}^+ &= k^h d^0 - g^h d^+,
\end{aligned}$$

де a^0 , a^- — поверхневі концентрації донорного газу в нейтральному та іонізованому станах, відповідно;

d^0 , d^- — поверхневі концентрації легуючої донорної поверхневої домішки в нейтральному та іонізованому станах, відповідно;

N^* — загальна кількість адсорбційних центрів;

k_a^A , k_a^D — константи адсорбції та десорбції;

k^e , g^e — ймовірності екстракції та інжекції електрону поверхневими центрами;

k^h , g^h — ймовірності екстракції та інжекції дірки поверхневими центрами.

Відповідну систему лінійного наближення можна дати співвідношеннями:

$$\begin{aligned}\Delta \dot{a}^0 &= k^A(N * -a^0 - a^- - d)\Delta p - \\ &- (k^A p + k^D + k^e)\Delta a^0 - (k^A p - g^e)\Delta a^- + k^e a^0 \Delta u_S; \\ \Delta \dot{a}^- &= k^e \Delta a^0 - g^e \Delta a^- - k^e a^0 \Delta u_S; \\ \Delta \dot{d}^+ &= -k^h \Delta d^+ - g^h \Delta d^+ + k^h d^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta d^+).\end{aligned}$$

Якщо ввести позначення:

$$\begin{aligned}c_p &= k^A(N * -a^0 - a^- - d); \\ c_{0u} &= k^e a^0; \\ c_u &= k_{US}; \\ c_{a0} &= k^A p + k^D + k^e + k^h; \\ c_{a^-} &= k^A p - g^e,\end{aligned}$$

то можна записати:

$$\begin{aligned}c_{a0}\Delta a^0 + \Delta \dot{a}^0 &= c_p \Delta p - c_{a^-} \Delta a^- + c_{0u} \Delta u_S; \\ g^e \Delta a^- + \Delta \dot{a}^- &= k^e \Delta a^0 - k^e a^0 \Delta u_S; \\ (k^h + g^h) \Delta d^+ + \Delta \dot{d}^+ &= k^h d^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= c_u (\Delta a^- - \Delta d^+).\end{aligned}$$

Застосовуючи перетворення Лапласа до відповідних лінійних диференційних рівнянь, отримаємо:

$$\begin{aligned}c_{a0}(1 + T_{a0}s)\Delta a^0 &= c_p \Delta p - c_{a^-} \Delta a^- + c_{0u} \Delta u_S; \\ g^e(1 + T_{a^-}s)\Delta a^- &= k^e \Delta a^0 - k^e a^0 \Delta u_S; \\ (k^h + g^h)(1 + T_{a^+}s)\Delta a^+ &= k^h d^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= c_u (\Delta a^- - \Delta d^+)\end{aligned}$$

або:

$$\begin{aligned}\Delta a^0 &= W_{a0}(c_p \Delta p - c_{a^-} \Delta a^- + c_{0u} \Delta u_S); \\ \Delta a^- &= W_{a1}(k^e \Delta a^0 - k^e a^0 \Delta u_S); \\ \Delta d^+ &= W_{a1} k^h d^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= c_u (\Delta a^- - \Delta d^+),\end{aligned}\tag{9}$$

де

$$W_{a0} = \frac{T_{a0}}{1 + T_{a0}s};$$

$$W_{a-} = \frac{T_{a-}}{1 + T_{a-}s};$$

$$W_{d+} = \frac{T_{d+}}{1 + T_{d+}s};$$

$$T_{a0} = \frac{1}{c_{a0}};$$

$$T_{a-} = \frac{1}{g^e};$$

$$T_{d+} = \frac{1}{k^h + g^h}.$$

Відповідну топологічну модель, що відображає лінію вимірювального перетворення парціального тиску акцепторного газу в інформативний параметр вихідного сигналу чутливого елемента напівпровідникового сенсора за наявності донорного поверхневого легування, показано на рис. 8.4.

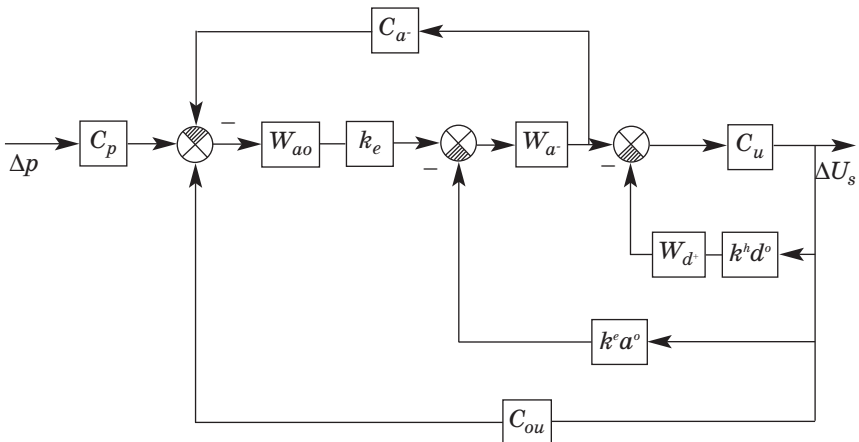


Рис. 8.4. Структурна схема лінії вимірювального перетворення на поверхні ЧЕ напівпровідникового сенсора газу при хемосорбції акцепторного газу за наявності донорної поверхневої домішки (поверхневого біографічного заряду донорного типу)

Виконавши відповідні перетворення, можна отримати еквівалентну передаточну функцію:

$$\Delta u_S = W_A(s)\Delta p;$$

$$W_F(s) = k \frac{1 + T_1^0 s}{1 + T_1 s + T_2 s^2 + T_3 s^3},$$

що відповідає структурній схемі згідно зі співвідношеннями (9) та рис. 8.4. Тут:

$$k = \frac{c_u c_p T_{a0} k_{11}}{T_{a0} + c_u (a^0 k_{11} + T_{a0} T_{d+} k_{d1})};$$

$$T_1^0 = T_{d+};$$

$$T_1 = T_{a0} [T_{d+} + a^0 c_u k_{11} + T_{11} (1 + c_u k_{d1} T_{d+})];$$

$$T_2 = T_{a0} [T_{11} T_{d+} + (1 + c_u k_{d1} T_{d+}) T_{12}];$$

$$T_3 = T_{a0} T_{d+} T_{12};$$

$$T_{11} = \frac{T_{a0} + T_{a-}}{k_{00}};$$

$$T_{12} = \frac{T_{a0} T_{a-}}{k_{00}};$$

$$k_{11} = \frac{T_{a0} T_{a-}}{k_{00}} k^e;$$

$$k_{00} = 1 + c_{a-} k^e T_{a0} T_{a-};$$

$$k_{d1} = k^h d^0.$$

Завершуючи розгляд цієї постановки задачі, запишемо систему лінійного наближення в нормальній формі Коші:

$$\dot{x}_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + bu;$$

$$\dot{x}_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3;$$

$$\dot{x}_3 = a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3;$$

$$y = c_2x_2 + c_3x_3,$$

де:

$$x_1 = \Delta a^0;$$

$$x_2 = \Delta a^-;$$

$$\begin{aligned}
x_2 &= \Delta a^+; \\
u &= \Delta p; \\
y &= \Delta u_S; \\
a_{11} &= -c_{a0}; \\
a_{12} &= -c_{a-} + c_{0u}c_u; \\
a_{13} &= -c_{0u}c_u; \\
a_{21} &= k^e; \\
a_{22} &= -g^e - c_u c_{u-}; \\
a_{23} &= c_u c_{u-}; \\
a_{31} &= 0; \\
a_{32} &= c_u c_{u+}; \\
a_{33} &= -g^h - c_u c_{u+}; \\
c_2 &= c_u = k_{US}; \\
c_3 &= -c_u; \\
b = c_p &= k^A(N * -a^0 - a^- - d); \\
c_{u-} &= k^e a^0; \\
c_{u+} &= k^h d^0.
\end{aligned}$$

ВИСНОВКИ

Проведений розгляд найпростіших випадків хемосорбції ідеальних газів на поверхні напівпровідника створює основу для детального аналізу процесу методами теорії оптимального управління, Однак уже на цьому етапі можна відзначити, що хемосорбція акцепторного газу на адсорбенті p -типу (донорного — на адсорбенті n -типу) викликає принципово нестійкі перехідні процеси, що ілюструється інверсією від'ємного зворотного зв'язку на додатній у відповідних топологічних моделях. У цьому ж полягає і складність динаміки простого амфотерного центру, як це видно з коефіцієнта передачі та постійних часу самої еквівалентної передаточної функції.

Аналогічно можуть бути описані й більш складні ситуації, що реалізуються на поверхні напівпровідника.

Розділ 2. СИСТЕМНО-СТРУКТУРНИЙ АНАЛІЗ ВІДГУКУ ПОВЕРХНІ НАПІВПРОВІДНИКА В УМОВАХ ПОПЕРЕЧНОГО ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ

Пристрої, що реалізують застосування так званого ефекту поля, широко поширені серед виробів мікроелектроніки, зокрема і в техніці газового аналізу [5].

У найпростішому випадку поверхні напівпровідника достатньої товщини та хемосорбції ідеального адсорбату динаміку відгуку поверхневого потенціалу на варіації зовнішнього поперечного електричного поля у першому наближенні, по аналогії з [1], можна описати системою рівнянь (1.а), яка представлена у попередньому розділі. Розглянемо деякі прості випадки [6], що важливі для розуміння специфіки задачі.

2.1. Акцепторний поверхневий стан

Система рівнянь (1.а) у цьому випадку має вигляд:

$$\dot{a}^- = k^e(a - a^-) - g^e a^-,$$

де a , a^- — повна та іонізована поверхневі концентрації часток, що утворюють не взаємодіючі з газовою фазою та не розчинні в об'ємі напівпровідника поверхневі стани акцепторного типу;

k^e , g^e — ймовірності екстракції та інжекції електрону цими поверхневими станами.

Відповідну систему лінійного наближення можна виразити співвідношеннями:

$$\Delta \dot{a}^- = (-k^e - g^e) \Delta a^- - k^e a^0 \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = k_{US} \Delta a^- + k_V \Delta V$$

або:

$$\Delta \dot{a}^- = -c_{a1} \Delta a^- - c_{au} \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = k_{US} \Delta a^- + k_V \Delta V,$$

де

$$c_{a1} = k^e + g^e;$$

$$c_{au} = k^e a^0;$$

$$a^0 = a - a^-.$$

А тоді:

$$c_{a1}\Delta a^- + \Delta \dot{a}^- = -c_{au}\Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = k_{US}\Delta a^- + k_V\Delta V.$$

Застосовуючи перетворення Лапласа, отримаємо:

$$c_{a1}(1 + T_{a1}s)\Delta a^- = -c_{au}\Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = k_{US}\Delta a^- + k_V\Delta V$$

або:

$$\Delta a^- = -W_{a1}c_{au}\Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = k_{US}\Delta a^- + k_V\Delta V, \tag{10}$$

де

$$W_{a1} = \frac{T_{a1}}{1 + T_{a1}s};$$

$$T_{a1} = \frac{1}{c_{a1}};$$

$$c_{a1} = k^e + g^e.$$

Відповідну топологічну модель, що відображає структуру процесу відгуку поверхневого потенціалу на варіації поперечного електричного поля, показано на рис. 8.5.

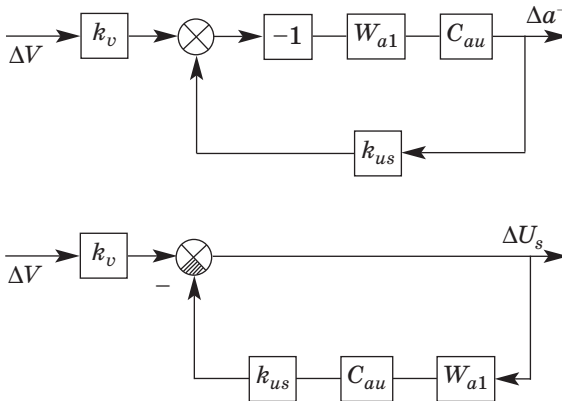


Рис. 8.5. Структурна схема послідовності проходження сигналу ефекта поля за наявності акцепторного поверхневого стану

Виконавши відповідні алгебраїчні перетворення, можна отримати еквівалентну передаточну функцію, що відповідає структурній схемі згідно зі співвідношеннями (10):

$$\Delta u_S = W_A(s)\Delta V;$$

$$W_{DA}(s) = k \frac{1 + T_1^0 s}{1 + T_1 s},$$

де

$$k = \frac{k_V}{k_0};$$

$$T_1 = \frac{T_{a1}}{k_0};$$

$$T_1^0 = T_{a1};$$

$$k_0 = 1 + k_{US}c_{au}T_{a1}.$$

У нормальній формі Коші отримані співвідношення мають вигляд:

$$\dot{x}_1 = a_{11}x_1 + bf;$$

$$y = c_1x_1,$$

де

$$x_1 = \Delta a^-;$$

$$f = \Delta V;$$

$$y = \Delta u_S;$$

$$a_{11} = -c_{a1} - c_{au}k_{US};$$

$$c_1 = k_{US};$$

$$b = -k_Vc_{au}.$$

2.2. Донорний поверхневий стан

Система рівнянь (1.a) у цьому випадку має вигляд:

$$\dot{d}^+ = k^h(d - d^+) - g^hd^+,$$

де d , d^+ — повна та іонізована поверхневі концентрації часток, що утворюють не взаємодіючі з газовою фазою та не розчинні в об'ємі напівпровідника поверхневі стани донорного типу;

k^h , g^h — ймовірності екстракції та інжекції дірки цими поверхневими станами.

Відповідну систему лінійного наближення можна дати співвідношеннями:

$$\begin{aligned}\Delta \dot{d}^+ &= (-k^h - g^h)\Delta d^+ + k^h d^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= -k_{US}\Delta d^+ + k_V \Delta V\end{aligned}$$

або:

$$\begin{aligned}\Delta \dot{d}^+ &= -c_{d1}\Delta d^+ + c_{du}\Delta u_S; \\ \Delta u_S &= -k_{US}\Delta d^+ + k_V \Delta V,\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}c_{d1} &= k^h + g^h; \\ c_{du} &= k^h d^0; \\ d^0 &= d - d^+.\end{aligned}$$

А тоді:

$$\begin{aligned}c_{d1}\Delta d^+ + \Delta \dot{d}^+ &= c_{du}\Delta u_S; \\ \Delta u_S &= -k_{US}\Delta d^+ + k_V \Delta V.\end{aligned}$$

Застосовуючи перетворення Лапласа, отримаємо:

$$\begin{aligned}c_{d1}(1 + T_{d1}s)\Delta d^+ &= c_{du}\Delta u_S; \\ \Delta u_S &= -k_{US}\Delta d^+ + k_V \Delta V\end{aligned}$$

або:

$$\begin{aligned}\Delta d^+ &= W_{d1}c_{du}\Delta u_S; \\ \Delta u_S &= -k_{US}\Delta d^+ + k_V \Delta V,\end{aligned}\tag{11}$$

де

$$\begin{aligned}W_{d1} &= \frac{T_{d1}}{1 + T_{d1}s}; \\ T_{d1} &= \frac{1}{c_{d1}}; \\ c_{d1} &= k^h + g^h.\end{aligned}$$

Відповідну топологічну модель, що відображає структуру процесу відгуку поверхневого потенціалу на варіації поперечного електричного поля, показано на рис. 8.6.

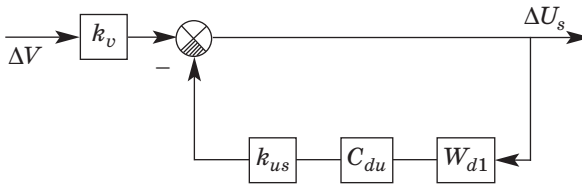


Рис. 8.6. Структурна схема послідовності проходження сигналу ефекта поля за наявності донорного поверхневого стану

Виконавши відповідні алгебраїчні перетворення, можна отримати еквівалентну передаточну функцію, що відповідає структурній схемі згідно зі співвідношеннями (11):

$$\Delta u_s = W_D(s)\Delta V;$$

$$W_{DA}(s) = k \frac{1 + T_1^0 s}{1 + T_1 s},$$

де

$$k = \frac{k_V}{k_0};$$

$$T_1 = \frac{T_{d1}}{k_0};$$

$$T_1^0 = T_{d1};$$

$$k_0 = 1 + k_{US}c_{du}T_{d1}.$$

У нормальній формі Коші отримані співвідношення мають вигляд:

$$\dot{x}_1 = a_{11}x_1 + bf;$$

$$y = c_1x_1,$$

де

$$x_1 = \Delta a^+;$$

$$f = \Delta V;$$

$$y = \Delta u_s;$$

$$a_{11} = -c_{d1} - c_{du}k_{US};$$

$$c_1 = -k_{US};$$

$$b = k_Vc_{du}.$$

2.3. Акцепторний та донорний поверхневий стани

Система рівнянь (1.а) у цьому випадку має вигляд:

$$\begin{aligned}\dot{a}^- &= k^e(a - a^-) - g^e a^-; \\ \dot{d}^+ &= k^h(d - d^+) - g^h d^+.\end{aligned}$$

Відповідна система лінійного наближення дається співвідношеннями:

$$\begin{aligned}\Delta \dot{a}^- &= (-k^e - g^e) \Delta a^- - k^e a^0 \Delta u_S; \\ \Delta \dot{d}^+ &= (-k^h - g^h) \Delta d^+ + k^h d^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta d^+) + k_V \Delta V\end{aligned}$$

або:

$$\begin{aligned}\Delta \dot{a}^- &= -c_{a1} \Delta a^- - c_{au} \Delta u_S; \\ \Delta \dot{d}^+ &= -c_{d1} \Delta d^+ + c_{du} \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta d^+) + k_V \Delta V,\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}c_{a1} &= k^e + g^e; \\ c_{au} &= k^e a^0; \\ a^0 &= a - a^-; \\ c_{d1} &= k^h + g^h; \\ c_{du} &= k^h d^0; \\ d^0 &= d - d^+.\end{aligned}$$

А тоді:

$$\begin{aligned}c_{a1} \Delta a^- + \Delta \dot{a}^- &= -c_{au} \Delta u_S; \\ c_{d1} \Delta d^+ + \Delta \dot{d}^+ &= c_{du} \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta d^+) + k_V \Delta V.\end{aligned}$$

Застосовуючи перетворення Лапласа, отримаємо:

$$\begin{aligned}c_{a1}(1 + T_{a1}s) \Delta a^- &= -c_{au} \Delta u_S; \\ c_{d1}(1 + T_{d1}s) \Delta d^+ &= c_{du} \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta d^+) + k_V \Delta V\end{aligned}$$

або:

$$\begin{aligned}\Delta a^- &= -W_{a1}c_{au}\Delta u_S; \\ \Delta d^+ &= W_{d1}c_{du}\Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta d^+) + k_V\Delta V,\end{aligned}\tag{12}$$

де

$$\begin{aligned}W_{a1} &= \frac{T_{a1}}{1 + T_{a1}s}; \\ T_{a1} &= \frac{1}{c_{a1}}; \\ c_{a1} &= k^e + g^e; \\ W_{d1} &= \frac{T_{d1}}{1 + T_{d1}s}; \\ T_{d1} &= \frac{1}{c_{d1}}; \\ c_{d1} &= k^h + g^h.\end{aligned}$$

Відповідну топологічну модель, що відображає структуру процесу відгуку поверхневого потенціалу на варіації поперечного електричного поля, показано на рис. 8.7.

Виконавши відповідні алгебраїчні перетворення, можна отримати еквівалентну передаточну функцію, що відповідає структурній схемі згідно зі співвідношеннями (12):

$$\Delta u_S = W_{DA}(s)\Delta p;$$

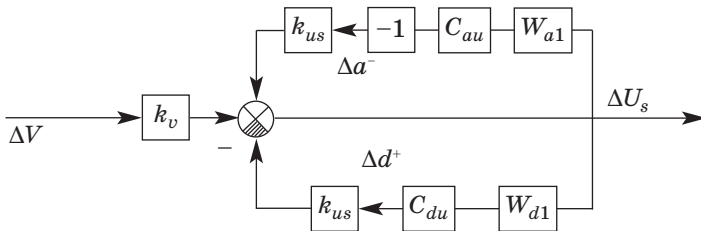


Рис. 8.7. Структурна схема послідовності проходження сигналу ефекта поля за наявності акцепторного та донорного поверхневих станів

$$W_{DA}(s) = k \frac{1 + T_1^0 s + T_2^0 s^2}{1 + T_1 s + T_2 s^2},$$

де

$$k = \frac{k_V}{k_{AD}};$$

$$k_{AD} = 1 + k_{US}(c_{au}T_{a1} + c_{du}T_{d1});$$

$$T_1 = T_{d1} + T_{a1};$$

$$T_2 = T_{d1}T_{a1};$$

$$T_1^0 = \frac{T_{a1} + T_{d1} + k_{US}T_{a1}T_{d1}(c_{au} + c_{du})}{k_{AD}};$$

$$T_2^0 = \frac{T_{d1}T_{a1}}{k_{AD}}.$$

У нормальній формі Коші отримані співвідношення мають вигляд:

$$\dot{x}_1 = a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + b_1f;$$

$$\dot{x}_2 = a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + b_2f;$$

$$y = c_1x_1 + c_2x_2 + d_1f,$$

де

$$x_1 = \Delta a^-;$$

$$x_2 = \Delta a^+;$$

$$f = \Delta V;$$

$$y = \Delta u_S;$$

$$a_{11} = -c_{a1} - c_{au}k_{US};$$

$$a_{12} = c_{au}k_{US};$$

$$a_{21} = c_{du}k_{US};$$

$$a_{22} = -c_{d1} - c_{du}k_{US};$$

$$c_1 = k_{US};$$

$$c_2 = -k_{US};$$

$$b_1 = -k_V c_{au};$$

$$b_2 = k_V c_{du};$$

$$d_1 = k_V.$$

2.4. Амфотерний поверхневий стан

Система рівнянь (1.a) у цьому випадку має вигляд:

$$\begin{aligned}\dot{a}^- &= k^e(a^- - a^+) - g^e a^-; \\ \dot{a}^+ &= k^h(a^- - a^+) - g^h a^+.\end{aligned}$$

Відповідну систему лінійного наближення можна дати співвідношеннями:

$$\begin{aligned}\Delta\dot{a}^- &= (-k^e - g^e)\Delta a^- - k^e\Delta a^+ - k^e a^0 \Delta u_S; \\ \Delta\dot{a}^+ &= (-k^h - g^h)\Delta a^+ - k^h\Delta a^- + k^h a^0 \Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta a^+) + k_V \Delta V\end{aligned}$$

або:

$$\begin{aligned}\Delta\dot{a}^- &= -c_{a1}\Delta a^- - k^e\Delta a^+ - c_{au}\Delta u_S; \\ \Delta\dot{a}^+ &= -c_{d1}\Delta a^+ - k^h\Delta a^- + c_{du}\Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta a^+) + k_V \Delta V,\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}c_{a1} &= k^e + g^e; \\ c_{au} &= k^e a^0; \\ c_{d1} &= k^h + g^h; \\ c_{du} &= k^h a^0.\end{aligned}$$

А тоді:

$$\begin{aligned}c_{a1}\Delta a^- + \Delta\dot{a}^- &= -k^e\Delta a^+ - c_{au}\Delta u_S; \\ c_{d1}\Delta a^+ + \Delta\dot{a}^+ &= -k^h\Delta a^- + c_{du}\Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta a^+) + k_V \Delta V.\end{aligned}$$

Застосовуючи перетворення Лапласа, отримаємо:

$$\begin{aligned}c_{a1}(1 + T_{a1}s)\Delta a^- &= -k^e\Delta a^+ - c_{au}\Delta u_S; \\ c_{d1}(1 + T_{d1}s)\Delta a^+ &= -k^h\Delta a^- + c_{du}\Delta u_S; \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta a^+) + k_V \Delta V\end{aligned}$$

або:

$$\begin{aligned}\Delta a^- &= W_{a1}(-k^e\Delta a^+ - c_{au}\Delta u_S); \\ \Delta a^+ &= W_{d1}(-k^h\Delta a^- + c_{du}\Delta u_S); \\ \Delta u_S &= k_{US}(\Delta a^- - \Delta a^+) + k_V \Delta V,\end{aligned}\tag{13}$$

де

$$\begin{aligned}
 k &= \frac{k_V}{k_{AD}}; \\
 k_{AD} &= 1 + k_{US}(k_D + k_A); \\
 T_1^0 &= \frac{T_1 + k_{US}(k_A T_{A3} + k_D T_{D3})}{k_{AD}}; \\
 T_1^0 &= \frac{T_2}{k_{AD}}; \\
 k_D &= \frac{k_d^1 T_{d1}}{k_d^0}; \\
 k_d^1 &= c_{du} + k^h c_{au} T_{a1}; \\
 T_{D3} &= \frac{c_{du} T_{a1}}{k_d^1}; \\
 k_d^0 &= 1 - k^h k^e T_{d1} T_{a1}; \\
 T_{D1} &= \frac{T_{d1} + T_{a1}}{k_d^0}; \\
 T_{D2} &= \frac{T_{d1} T_{a1}}{k_d^0}; \\
 k_A &= \frac{k_a^1 T_{a1}}{k_a^0}; \\
 k_a^1 &= c_{au} + k^h c_{du} T_{d1}; \\
 T_{A3} &= \frac{c_{au} T_{d1}}{k_a^1}; \\
 k_a^0 &= 1 - k^h k^e T_{d1} T_{a1}; \\
 T_{A1} &= \frac{T_{d1} + T_{a1}}{k_a^0}; \\
 T_{A2} &= \frac{T_{d1} T_{a1}}{k_a^0}; \\
 T_1 &= T_{A1} = T_{D1}; \\
 T_2 &= T_{A2} = T_{D2}.
 \end{aligned}$$

У нормальній формі Коші отримані співвідношення мають вигляд:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + b_1f; \\ \dot{x}_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + b_2f; \\ y &= c_1x_1 + c_2x_2 + d_1f, \end{aligned} \tag{14}$$

де

$$\begin{aligned} x_1 &= \Delta a^-; \\ x_2 &= \Delta a^+; \\ f &= \Delta V; \\ y &= \Delta u_S; \\ a_{11} &= -c_{a1} - c_{au}k_{US}; \\ a_{12} &= -k^e + c_{au}k_{US}; \\ a_{21} &= -k^h + c_{du}k_{US}; \\ a_{22} &= -c_{d1} - c_{du}k_{US}; \\ c_1 &= k_{US}; \\ c_2 &= -k_{US}; \\ b_1 &= -k_V c_{au}; \\ b_2 &= k_V c_{du}; \\ d_1 &= k_V. \end{aligned}$$

ВИСНОВКИ

Розглянуто найпростіші випадки реакції ідеальної поверхні напівпровідника на дію зовнішнього поперечного електричного поля. Властивості поверхні визначаються наявністю поверхневих електронних станів: акцепторного, донорного, системи акцепторний плюс донорний, амфотерного. Аналіз виконано методами теорії автоматичного управління як у термінах передавальних функцій, так і в термінах простору станів. Виклад ілюстровано відповідними топологічними моделями.

Глава IX

АНАЛІЗ І СИНТЕЗ СЕНСОРІВ У НАБЛИЖЕННІ ДО КОНЦЕПЦІЇ ХАУФФЕ

РОЗДІЛ 1. ХЕМОСОРБЦІЯ ПРОСТИХ ІДЕАЛЬНИХ ГАЗІВ НА АТОМАРНО ЧИСТІЙ ПОВЕРХНІ НАПІВПРОВІДНИКА

Адсорбція акцепторного газу. У наближенні до концепції Хауффе [1] відсутнє поняття сильного та слабкого зв'язку при хемосорбції, а просто вважають, що фізична адсорбція є її (хемосорбції) проміжним актом. Повна концентрація A хемосорбованого акцепторного газу визначається фізичною адсорбцією, так що в області Генрі можна записати:

$$A = bp.$$

Оскільки кінетика перезарядки відповідних поверхневих центрів у такому випадку дається співвідношенням:

$$\dot{a} = (A - a)k - ag,$$

то власне для хемосорбції, якщо знехтувати динамікою фізичної адсорбції, отримуємо:

$$\dot{a} = (bp - a)k - ag.$$

А тоді лінеаризована відносно робочої точки математична модель сенсора матиме вигляд:

$$\Delta \dot{a} = (-k - g) \Delta a + kb \Delta p + (bp - a)k(-\Delta u_s);$$

$$\Delta u_s = S(1,1) \Delta a.$$

Приведемо отриману систему рівнянь до одного рівняння, вважаючи поверхневу концентрацію акцепторного газу за вихідний сигнал сенсора. Маємо:

$$\Delta \dot{a} = (-k - g) \Delta a + kb \Delta p - (bp - a)kS(1,1) \Delta a$$

або:

$$\Delta \dot{a} = [-k - g - (bp - a)kS(1,1)] \Delta a + kb \Delta p,$$

звідки:

$$\Delta \dot{a} + [k + g + (bp - a)kS(1,1)] \Delta a = kb \Delta p.$$

Позначимо:

$$T_a = [k + g + (bp - a)kS(1,1)]^{-1} = \{k[1 + (bp - a)S(1,1)] + g\}^{-1};$$

$$k_a = kbT_a = \\ = kb / [k[1+(bp-a)S(1,1)]+g] = b/[1+(bp-a)S(1,1)+g/k]$$

та запишемо результат у стандартній формі запису лінійних диференційних рівнянь:

$$T_a \Delta \dot{a} + \Delta a = k_a \Delta p,$$

так що у зображеннях за Лапласом матимемо:

$$(T_a s + 1) \Delta a = k_a \Delta p$$

або у вигляді передаточних функцій:

$$\Delta a = W_a \Delta p;$$

$$W_a = \frac{k_a}{1 + T_a s}.$$

Можна також отримати топологічну модель ситуації на поверхні. Для цього перепишемо вихідну систему рівнянь у вигляді:

$$T_A \Delta \dot{a} + \Delta a = k_p \Delta p - k_A \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = k_U \Delta a,$$

де застосовано такі позначення:

$$T_A = (k + g)^{-1};$$

$$k_p = kb(k + g)^{-1} = b/(1 + k/g) = kbT_A;$$

$$k_A = (bp - a)k/(k + g) = (bp - a)/(1 + k/g) = (bp - a)kT_A;$$

$$k_U = S(1,1).$$

А тоді у зображеннях за Лапласом:

$$(T_A s + 1) \Delta a = k_p \Delta p - k_A \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = k_U \Delta a$$

або:

$$\Delta a = W_A (k_p \Delta p - k_A \Delta u_S);$$

$$\Delta u_S = k_U \Delta a,$$

де

$$W_A = \frac{1}{T_A s + 1}.$$

Відповідну топологічну модель показано на рис. 9.1.

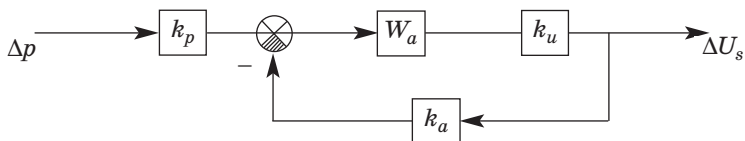


Рис. 9.1. Структурна схема лінії вимірювального перетворення на поверхні ЧЕ за хемосорбції акцепторного газу

Адсорбція донорного газу. У наближенні до концепції Хауффе [1] повна концентрація D хемосорбованого донорного газу визначається фізичною адсорбцією, так що в області Генрі можна записати:

$$D = bp.$$

Оскільки кінетика перезарядки відповідних поверхневих центрів у такому випадку дається співвідношенням:

$$\dot{d} = (D - d)k - dg,$$

то власне для хемосорбції, якщо знехтувати динамікою фізичної адсорбції, отримаємо:

$$d = (bp - d)k - dg.$$

А тоді лінеаризована відносно робочої точки математична модель сенсора матиме вигляд:

$$\Delta \dot{d} = (-k - g)\Delta d + kb\Delta p + (bp - d)k\Delta u_s;$$

$$\Delta u_s = -|S(1,1)|\Delta d.$$

Приведемо отриману систему рівнянь до одного рівняння, вважаючи поверхневу концентрацію донорного газу за вихідний сигнал сенсора. Маємо:

$$\Delta \dot{d} = (-k - g)\Delta d + kb\Delta p - (bp - d)k|S(1,1)|\Delta d$$

або:

$$\Delta \dot{d} = [-k - g - (bp - d)k|S(1,1)|]\Delta d + kb\Delta p,$$

звідки:

$$\Delta \dot{d} + [k + g + (bp - d)k|S(1,1)|]\Delta d = kb\Delta p.$$

Позначаючи

$$T_d = [k + g + (bp - d)k|S(1,1)|]^{-1} = \{k[1 + (bp - d)|S(1,1)|] + g\}^{-1},$$

$$\begin{aligned} k_d &= kbT_d = kb / [k[1 + (bp - d)|S(1,1)|] + g] = \\ &= b / [1 + (bp - d)|S(1,1)| + g/k], \end{aligned}$$

запишемо результат у стандартній формі запису [2] лінійних диференційних рівнянь:

$$T_d \Delta \dot{d} + \Delta d = k_d \Delta p,$$

так що у зображеннях за Лапласом матимемо:

$$(T_d s + 1) \Delta d = k_d \Delta p$$

або у вигляді передаточних функцій:

$$\Delta d = W_d \Delta p;$$

$$W_d = \frac{k_d}{1 + T_d s}.$$

Можна також отримати топологічну модель ситуації на поверхні. Для цього переписемо вихідну систему рівнянь у вигляді:

$$\Delta \dot{d} = (-k - g) \Delta d + kb \Delta p + (bp - d) k \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = -S(1,1) \Delta a$$

або:

$$\Delta \dot{d} + (k + g) \Delta d = kb \Delta p + (bp - d) k \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = -|S(1,1)| \Delta d$$

та позначимо:

$$c_A = (k + g);$$

$$c_p = kb;$$

$$c_u = (bp - a) k;$$

$$c_{au} = S(1,1);$$

$$c_{ou} = |f|,$$

так що:

$$T_D \Delta \dot{d} + \Delta d = k_p \Delta p + k_D \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = -k_U \Delta d.$$

А тоді у зображеннях за Лапласом:

$$(T_D s + 1) \Delta d = k_p \Delta p + k_D \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = -k_U \Delta d$$

або:

$$\Delta d = W_D(s) (k_p \Delta p + k_D \Delta u_S);$$

$$\Delta u_S = -k_U \Delta d,$$

де

$$W_D = \frac{1}{T_D s + 1}.$$

Відповідну топологічну модель показано на рис. 9.2.

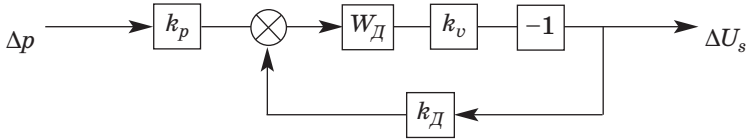


Рис. 9.2. Структурна схема лінії вимірювального перетворення на поверхні ЧЕ за хемосорбції донорного газу

РОЗДІЛ 2. АДСОРБЦІЯ АКЦЕПТОРНОГО ГАЗУ ЗА НАЯВНОСТІ ПОВЕРХНЕВОГО ЛЕГУВАННЯ

Адсорбція акцепторного газу за наявності на поверхні донорної домішки. У цьому випадку лінеаризована відносно робочої точки математична модель сенсора матиме вигляд:

$$\Delta \dot{a} = -c_a \Delta a - c_{au} \Delta u_S + c_p \Delta p;$$

$$\Delta \dot{d} = -c_d \Delta d + c_{du} \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = c_u \Delta a - c_u \Delta d.$$

Приведемо отриману систему звичайних диференціальних рівнянь із постійними коефіцієнтами до одного рівняння другого порядку, вважаючи поверхневий потенціал за вихідний сигнал сенсора. Для цього спочатку послідовно вилучимо змінні, що позначають концентрації поверхневих фракцій. Почнемо з донорної поверхневої фракції. З останнього рівняння системи маємо:

$$\Delta d = \frac{1}{c_u} (-\Delta u_S + c_u \Delta a) = -\frac{1}{c_u} \Delta u_S + \Delta a,$$

так що після підстановки у друге рівняння системи отримаємо:

$$\Delta \dot{d} = -c_d \left(-\frac{1}{c_u} \Delta u_S + \Delta a \right) + c_{du} \Delta u_S = \left(\frac{c_d}{c_u} + c_{du} \right) \Delta u_S - c_d \Delta a.$$

Диференціюючи останнє рівняння системи та застосувавши знайдений вище результат, маємо:

$$\begin{aligned} \Delta \dot{u}_S &= c_u \Delta \dot{a} - c_u \Delta \dot{d} = c_u \Delta \dot{a} - c_u \left(\left(\frac{c_d}{c_u} + c_{du} \right) \Delta u_S - c_d \Delta a \right) = \\ &= c_u \Delta \dot{a} + c_d \Delta a - (c_d + c_u c_{du}) \Delta u_S, \end{aligned}$$

тобто $\Delta \dot{u}_S = c_u \Delta \dot{a} + c_u c_d \Delta a - (c_d + c_u c_{du}) \Delta u_S$.

Продиференціюємо знову отриманий вираз:

$$\Delta \ddot{u}_S = c_u \Delta \ddot{a} + c_u c_d \Delta \ddot{a} - (c_d + c_u c_{du}) \Delta \dot{u}_S$$

і, паралельно, виразимо з нього змінну, що відповідає концентрації поверхневої фракції хемосорбованого акцепторного газу:

$$c_u c_d \Delta a = \Delta \dot{u}_S - c_u \Delta \dot{a} + (c_d + c_u c_{du}) \Delta u_S.$$

Тобто

$$\Delta a = \frac{1}{c_u c_d} \Delta \dot{u}_S - \frac{1}{c_d} \Delta \dot{a} + \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{du}}{c_d} \right) \Delta u_S.$$

Підставляючи отримане співвідношення у перше рівняння вихідної системи:

$$\Delta \dot{a} = -c_a \left[\frac{1}{c_u c_d} \Delta \dot{u}_S - \frac{1}{c_d} \Delta \dot{a} + \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{du}}{c_d} \right) \Delta u_S \right] - c_{au} \Delta u_S + c_p \Delta p$$

та виконавши алгебраїчні перетворення:

$$\begin{aligned} \Delta \dot{a} = & -\frac{c_a}{c_u c_d} \Delta \dot{u}_S + \frac{c_a}{c_d} \Delta \dot{a} - c_a \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{du}}{c_d} \right) \Delta u_S - c_{au} \Delta u_S + c_p \Delta p = \\ & -\frac{c_a}{c_u c_d} \Delta \dot{u}_S + \frac{c_a}{c_d} \Delta \dot{a} - \left[c_a \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{du}}{c_d} \right) + c_{au} \right] \Delta u_S + c_p \Delta p, \end{aligned}$$

знайдемо:

$$\left(1 - \frac{c_a}{c_d} \right) \Delta \dot{a} = -\frac{c_a}{c_u c_d} \Delta \dot{u}_S - \left[c_a \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{du}}{c_d} \right) + c_{au} \right] \Delta u_S + c_p \Delta p.$$

Звідки:

$$\begin{aligned} \Delta \dot{a} = & -\frac{c_a}{c_u c_d \left(1 - \frac{c_a}{c_d} \right)} \Delta \dot{u}_S - \frac{c_a \frac{c_d + c_u c_{du}}{c_u c_d} + c_{au}}{1 - \frac{c_a}{c_d}} \Delta u_S + \frac{c_p}{1 - \frac{c_a}{c_d}} \Delta p = \\ = & -\frac{1}{c_u \left(\frac{c_d}{c_a} - 1 \right)} \Delta \dot{u}_S - \frac{\frac{c_d + c_u c_{du}}{c_u} + c_{au} \frac{c_d}{c_a}}{\frac{c_d}{c_a} - 1} \Delta u_S + \frac{c_p}{1 - \frac{c_a}{c_d}} \Delta p \end{aligned}$$

або:

$$\Delta \dot{a} = -\alpha_1 \Delta \dot{u}_S - \alpha_2 \Delta u_S + \alpha_3 \Delta p,$$

де

$$\alpha_1 = \frac{1}{c_u \left(\frac{c_d}{c_a} - 1 \right)};$$

$$\alpha_2 = \frac{\frac{c_d + c_u c_{du}}{c_u} + c_{au} \frac{c_d}{c_a}}{\frac{c_d}{c_a} - 1};$$

$$\alpha_3 = \frac{c_p}{1 - \frac{c_a}{c_d}}.$$

Також продиференціюємо отриманий вираз:

$$\Delta \ddot{a} = -\alpha_1 \Delta \ddot{u}_S - \alpha_2 \Delta \dot{u}_S + \alpha_3 \Delta \dot{p}.$$

Таким чином, підставляючи отримані результати в рівняння (*):

$$\begin{aligned} \Delta \ddot{u}_S &= c_u \Delta \ddot{a} + c_u c_d \Delta \dot{a} - (c_d + c_u c_{du}) \Delta \dot{u}_S = \\ &= c_u (-\alpha_1 \Delta \ddot{u}_S - \alpha_2 \Delta \dot{u}_S + \alpha_3 \Delta \dot{p}) + \\ &+ c_u c_d (-\alpha_1 \Delta \dot{u}_S - \alpha_2 \Delta u_S + \alpha_3 \Delta p) - (c_d + c_u c_{du}) \Delta \dot{u}_S = \\ &= -\alpha_1 c_u \Delta \ddot{u}_S - \alpha_2 c_u \Delta \dot{u}_S + \alpha_3 c_u \Delta \dot{p} - \alpha_1 c_u c_d \Delta \dot{u}_S - \\ &- \alpha_2 c_u c_d \Delta u_S + \alpha_3 c_u c_d \Delta p - (c_d + c_u c_{du}) \Delta \dot{u}_S = \\ &= -\alpha_1 c_u \Delta \ddot{u}_S + (-\alpha_2 c_u - \alpha_1 c_u c_d - (c_d + c_u c_{du})) \Delta \dot{u}_S - \\ &- \alpha_2 c_u c_d \Delta u_S + \alpha_3 c_u \Delta \dot{p} + \alpha_3 c_u c_d \Delta p, \end{aligned}$$

отримаємо:

$$\begin{aligned} (1 + \alpha_1 c_u) \Delta \ddot{u}_S + (\alpha_2 c_u + \alpha_1 c_u c_d + c_d + c_u c_{du}) \Delta \dot{u}_S + \\ + \alpha_2 c_u c_d \Delta u_S = \alpha_3 c_u c_d \left(\frac{1}{c_d} \Delta \dot{p} + \Delta p \right) \end{aligned}$$

або у стандартній формі запису лінійних диференційних рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{1 + \alpha_1 c_u}{\alpha_2 c_u c_d} \Delta \ddot{u}_S + \frac{\alpha_2 c_u + \alpha_1 c_u c_d + c_d + c_u c_{du}}{\alpha_2 c_u c_d} \Delta \dot{u}_S + \\ + \Delta u_S = \frac{\alpha_3}{\alpha_2} \left(\frac{1}{c_d} \Delta \dot{p} + \Delta p \right). \end{aligned}$$

Позначимо:

$$T_0 = \frac{1 + \alpha_1 c_u}{\alpha_2 c_u c_d};$$

$$T_1 = \frac{\alpha_2 c_u + \alpha_1 c_u c_d + c_d + c_u c_{du}}{\alpha_2 c_u c_d};$$

$$T_2 = \frac{1}{c_d};$$

$$k_1 = \frac{\alpha_3}{\alpha_2}.$$

Отже, в операторній формі результат має вигляд:

$$(T_0 s^2 + T_1 s + 1) \Delta u_S = k_1 (T_2 s + 1) \Delta p.$$

Адсорбція акцепторного газу за наявності на поверхні акцепторної домішки. У цьому випадку лінеаризована відносно робочої точки математична модель сенсора матиме вигляд:

$$\Delta \dot{a} = -c_a \Delta a - c_{au} \Delta u_S + c_p \Delta p;$$

$$\Delta \dot{b} = -c_d \Delta b - c_{bu} \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = c_u \Delta a + c_u \Delta b.$$

Приведемо отриману систему звичайних диференціальних рівнянь із постійними коефіцієнтами до одного рівняння другого порядку, вважаючи поверхневий потенціал за вихідний сигнал сенсора. Для цього спочатку послідовно виключимо змінні, що позначають концентрації поверхневих фракцій. Почнемо з домішкової акцепторної поверхневої фракції. З останнього рівняння системи маємо:

$$\Delta b = \frac{1}{c_u} (\Delta u_S - c_u \Delta a) = \frac{1}{c_u} \Delta u_S - \Delta a,$$

так що після підстановки результату в друге рівняння системи отримаємо:

$$\Delta \dot{b} = -c_b \left(\frac{1}{c_u} \Delta u_S - \Delta a \right) + c_{bu} \Delta u_S = - \left(\frac{c_b}{c_u} + c_{bu} \right) \Delta u_S + c_b \Delta a.$$

Диференціюючи останнє рівняння системи та застосувавши знайдений вище результат, маємо:

$$\Delta \dot{u}_S = c_u \Delta \dot{a} + c_u \Delta \dot{b} = c_u \Delta \dot{a} + c_u \left(- \left(\frac{c_b}{c_u} + c_{bu} \right) \Delta u_S + c_d \Delta a \right) =$$

$$= c_u \Delta \dot{a} + c_u c_b \Delta a - (c_b + c_u c_{bu}) \Delta u_S,$$

тобто $\Delta \dot{u}_S = c_u \Delta \dot{a} + c_u c_b \Delta a - (c_b + c_u c_{bu}) \Delta u_S$.

Продиференціюємо знову отриманий вираз:

$$\Delta \ddot{u}_S = c_u \Delta \ddot{a} + c_u c_b \Delta \ddot{a} - (c_b + c_u c_{bu}) \Delta \dot{u}_S$$

і, паралельно, виразимо з нього змінну, що відповідає концентрації поверхневої фракції хемосорбованого акцепторного газу

$$c_u c_b \Delta a = \Delta \dot{u}_S - c_u \Delta \dot{a} + (c_b + c_u c_{bu}) \Delta u_S.$$

Тобто

$$\Delta a = \frac{1}{c_u c_b} \Delta \dot{u}_S - \frac{1}{c_b} \Delta \dot{a} + \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{bu}}{c_b} \right) \Delta u_S.$$

Підставляючи отримане співвідношення у перше рівняння вихідної системи

$$\Delta \dot{a} = -c_a \left[\frac{1}{c_u c_b} \Delta \dot{u}_S - \frac{1}{c_b} \Delta \dot{a} + \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{bu}}{c_b} \right) \Delta u_S \right] - c_{au} \Delta u_S + c_p \Delta p$$

та виконавши алгебраїчні перетворення:

$$\begin{aligned} \Delta \dot{a} &= -\frac{c_a}{c_u c_b} \Delta \dot{u}_S + \frac{c_a}{c_b} \Delta \dot{a} - c_a \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{bu}}{c_b} \right) \Delta u_S - c_{au} \Delta u_S + c_p \Delta p = \\ &= -\frac{c_a}{c_u c_b} \Delta \dot{u}_S + \frac{c_a}{c_b} \Delta \dot{a} - \left[c_a \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{bu}}{c_b} \right) + c_{au} \right] \Delta u_S + c_p \Delta p, \end{aligned}$$

знайдемо:

$$\left(1 - \frac{c_a}{c_b} \right) \Delta \dot{a} = -\frac{c_a}{c_u c_b} \Delta \dot{u}_S - \left[c_a \left(\frac{1}{c_u} + \frac{c_{bu}}{c_b} \right) + c_{au} \right] \Delta u_S + c_p \Delta p.$$

Звідки:

$$\begin{aligned} \Delta \dot{a} &= -\frac{c_a}{c_u c_b \left(1 - \frac{c_a}{c_b} \right)} \Delta \dot{u}_S - \frac{c_a \frac{c_b + c_u c_{bu}}{c_u c_b} + c_{au}}{1 - \frac{c_a}{c_b}} \Delta u_S + \frac{c_p}{1 - \frac{c_a}{c_b}} \Delta p = \\ &= -\frac{1}{c_u \left(\frac{c_b}{c_a} - 1 \right)} \Delta \dot{u}_S - \frac{\frac{c_b + c_u c_{bu}}{c_u} \frac{c_b}{c_a} + c_{au}}{\frac{c_b}{c_a} - 1} \Delta u_S + \frac{c_p}{1 - \frac{c_a}{c_b}} \Delta p \end{aligned}$$

або:

$$\Delta \dot{a} = -\alpha_1 \Delta \dot{u}_S - \alpha_2 \Delta u_S + \alpha_3 \Delta p,$$

де

$$\alpha_1 = \frac{1}{c_u \left(\frac{c_b}{c_a} - 1 \right)};$$

$$\alpha_2 = \frac{\frac{c_b + c_u c_{bu}}{c_u} + c_{au} \frac{c_b}{c_a}}{\frac{c_b}{c_a} - 1};$$

$$\alpha_3 = \frac{c_p}{1 - \frac{c_a}{c_b}}.$$

Також продиференціюємо отриманий вираз:

$$\Delta \ddot{a} = -\alpha_1 \Delta \ddot{u}_S - \alpha_2 \Delta \dot{u}_S + \alpha_3 \Delta \dot{p}.$$

Отже, підставляючи отримані результати в рівняння (*):

$$\begin{aligned} & \Delta \ddot{u}_S = c_u \Delta \ddot{a} + c_u c_d \Delta \dot{a} - (c_d + c_u c_{du}) \Delta \dot{u}_S = \\ & = c_u (-\alpha_1 \Delta \ddot{u}_S - \alpha_2 \Delta \dot{u}_S + \alpha_3 \Delta \dot{p}) + c_u c_d (-\alpha_1 \Delta \dot{u}_S - \alpha_2 \Delta u_S + \alpha_3 \Delta p) - \\ & \quad - (c_d + c_u c_{du}) \Delta \dot{u}_S = -\alpha_1 c_u \Delta \ddot{u}_S - \alpha_2 c_u \Delta \dot{u}_S + \alpha_3 c_u \Delta \dot{p} - \\ & \quad - \alpha_1 c_u c_d \Delta \dot{u}_S - \alpha_2 c_u c_d \Delta u_S + \alpha_3 c_u c_d \Delta p - (c_d + c_u c_{du}) \Delta \dot{u}_S = \\ & \quad = -\alpha_1 c_u \Delta \ddot{u}_S + (-\alpha_2 c_u - \alpha_1 c_u c_d - (c_d + c_u c_{du})) \Delta \dot{u}_S - \\ & \quad - \alpha_2 c_u c_d \Delta u_S + \alpha_3 c_u \Delta \dot{p} + \alpha_3 c_u c_d \Delta p, \end{aligned}$$

отримаємо:

$$\begin{aligned} & (1 + \alpha_1 c_u) \Delta \ddot{u}_S + (\alpha_2 c_u + \alpha_1 c_u c_d + c_d + c_u c_{du}) \Delta \dot{u}_S + \\ & \quad + \alpha_2 c_u c_d \Delta u_S = \alpha_3 c_u c_d \left(\frac{1}{c_d} \Delta \dot{p} + \Delta p \right) \end{aligned}$$

або у стандартній формі запису лінійних диференційних рівнянь:

$$\begin{aligned} & \frac{1 + \alpha_1 c_u}{\alpha_2 c_u c_d} \Delta \ddot{u}_S + \frac{\alpha_2 c_u + \alpha_1 c_u c_d + c_d + c_u c_{du}}{\alpha_2 c_u c_d} \Delta \dot{u}_S + \\ & \quad + \Delta u_S = \frac{\alpha_3}{\alpha_2} \left(\frac{1}{c_d} \Delta \dot{p} + \Delta p \right). \end{aligned}$$

Позначимо:

$$T_0 = \frac{1 + \alpha_1 c_u}{\alpha_2 c_u c_b};$$

$$T_1 = \frac{\alpha_2 c_u + \alpha_1 c_u c_b + c_b + c_u c_{bu}}{\alpha_2 c_u c_b};$$

$$T_2 = \frac{1}{c_b};$$

$$k_1 = \frac{\alpha_3}{\alpha_2}.$$

Отже, в операторній формі результат має вигляд:

$$(T_0 s^2 + T_1 s + 1) \Delta u_S = k_1 (T_2 s + 1) \Delta p.$$

РОЗДІЛ 3. АДСОРБЦІЯ АКЦЕПТОРНОГО ГАЗУ ЗА НАЯВНОСТІ ЖОРСТКОГО ЗВОТНОГО ЗВ'ЯЗКУ ПО ПОВЕРХНЕВОМУ ПОТЕНЦІАЛУ

Адсорбція акцепторного газу за наявності позитивного жорсткого зворотного зв'язку по поверхневому потенціалу. Застосовуючи ефект поля, можна організувати позитивний зворотний зв'язок по поверхневому потенціалу. У цьому випадку лінеаризована відносно робочої точки математична модель сенсора матиме вигляд:

$$\Delta a = (-k - g) \Delta a + kb \Delta p + (bp - a) k (-\Delta u_S);$$

$$\Delta u_S = S(1,1) \Delta a + f \Delta V_{OC};$$

$$\Delta V_{OC} = k_{OC} \Delta u_S.$$

Позначимо:

$$c_A = (k + g);$$

$$c_p = kb;$$

$$c_u = (bp - a)k;$$

$$c_{au} = S(1,1);$$

$$c_{ou} = |f|.$$

А тоді:

$$\Delta \dot{a} + c_a \Delta a = c_p \Delta p - c_u \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = c_{au} \Delta a + c_{ou} \Delta V_{OC};$$

$$\Delta V_{OC} = k_{OC} \Delta u_S.$$

Застосувавши перетворення Лапласа, отримаємо:

$$(T_a s + 1) \Delta a = k_p \Delta p - k_u \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = c_{au} \Delta a + c_{ou} \Delta V_{OC};$$

$$\Delta V_{OC} = k_{OC} \Delta u_S,$$

де $T_a = 1/c_a$, $k_p = c_p/c_a$, $k_u = c_u/c_a$.

Відповідну топологічну модель, що відображає лінію вимірювального перетворення парціального тиску акцепторного газу в інформативний параметр вихідного сигналу напівпровідникового сенсора з позитивним жорстким зв'язком по поверхневому потенціалу, показано на рис. 9.3.

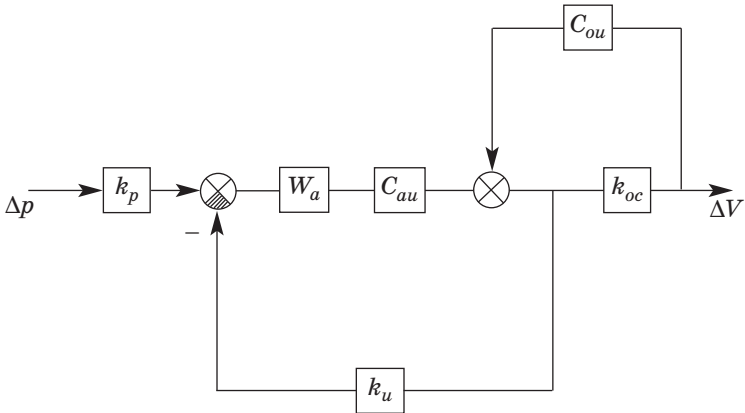


Рис. 9.3. Адсорбція акцепторного газу за наявності позитивного жорсткого заряду по поверхневому потенціалу

Виконавши відповідні перетворення, можна отримати еквівалентну передаточну функцію. Оскільки

$$\Delta \dot{a} = -c_a \Delta a + c_p \Delta p - c_u \Delta u_S;$$

$$\Delta u_S = c_{au} \Delta a + c_{ou} \Delta V_{OC};$$

$$\Delta V_{OC} = k_{OC} \Delta u_S,$$

то:

$$\Delta \dot{a} = -c_a \Delta a + c_p \Delta p - c_u \frac{c_{au}}{1 - c_{ou} k_{OC}} \Delta a$$

або:

$$\Delta \dot{a} + (c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 - c_{ou} k_{OC}}) \Delta a = c_p \Delta p.$$

Переходячи до зображень за Лапласом, отримуємо:

$$(T_{A+} s + 1) \Delta a = k_{A+} \Delta p,$$

де

$$T_{A+} = \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 - c_{ou} k_{OC}} \right)^{-1};$$
$$k_{A+} = c_p T_{A+} = c_p \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 - c_{ou} k_{OC}} \right)^{-1}.$$

У нормальній формі Коші відповідні співвідношення матимуть вигляд:

$$\Delta \dot{a} = - \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 - c_{ou} k_{OC}} \right) \Delta a + c_p \Delta p;$$
$$\Delta u_S = \frac{c_{au}}{1 - c_{ou} k_{OC}} \Delta a$$

або:

$$\dot{x}_1 = a_{11} x_1 + b_1 u;$$
$$y = c_1 x_1,$$

де

$$a_{11} = - \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 - c_{ou} k_{OC}} \right);$$
$$c_1 = \frac{c_{au}}{1 - c_{ou} k_{OC}};$$
$$b_1 = c_p;$$
$$x_1 = \Delta a;$$
$$u = \Delta p;$$
$$y = \Delta u_S.$$

Адсорбція акцепторного газу за наявності від'ємного жорсткого зворотного зв'язку по поверхневому потенціалу. Застосовуючи ефект поля, можна організувати негативний зворотний зв'язок по поверхневому потенціалу. У цьому випадку лінеаризована відносно робочої точки математична модель сенсора матиме вигляд:

$$\Delta \dot{a} = (-k - g) \Delta a + kb \Delta p + (bp - a)k (-\Delta u_S);$$
$$\Delta u_S = S(1, 1) \Delta a - f \Delta V_{OC};$$
$$\Delta V_{OC} = k_{OC} \Delta u_S.$$

Позначимо:

$$\begin{aligned}
 c_A &= (k + g); \\
 c_p &= kb; \\
 c_u &= (bp - a)k; \\
 c_{au} &= S(1,1); \\
 c_{ou} &= |f|.
 \end{aligned}$$

А тоді:

$$\begin{aligned}
 \Delta \dot{a} + c_a \Delta a &= c_p \Delta p - c_u \Delta u_S; \\
 \Delta u_S &= c_{au} \Delta a - c_{ou} \Delta V_{OC}; \\
 \Delta V_{OC} &= k_{OC} \Delta u_S.
 \end{aligned}$$

Застосувавши перетворення Лапласа, отримаємо:

$$\begin{aligned}
 (T_a s + 1) \Delta a &= k_p \Delta p - k_u \Delta u_S; \\
 \Delta u_S &= c_{au} \Delta a - c_{ou} \Delta V_{OC}; \\
 \Delta V_{OC} &= k_{OC} \Delta u_S,
 \end{aligned}$$

де

$$T_a = 1/c_a, k_p = c_p/c_a, k_u = c_u/c_a.$$

Відповідну топологічну модель, що відображає лінію вимірювального перетворення парціального тиску акцепторного газу в інформативний параметр вихідного сигналу напівпровідникового сенсора з негативним жорстким зв'язком по поверхневому потенціалу, показано на рис. 9.4.

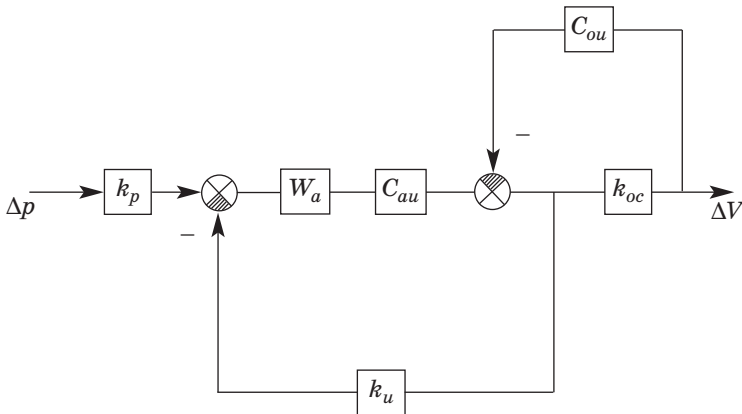


Рис. 9.4. Адсорбція акцепторного газу за наявності від'ємного жорсткого заряду по поверхневому потенціалу

Виконавши відповідні перетворення, можна отримати еквівалентну передаточну функцію. Оскільки

$$\Delta \dot{a} = -c_a \Delta a + c_p \Delta p - c_u \Delta u_s;$$

$$\Delta u_s = c_{au} \Delta a - c_{ou} \Delta V_{OC};$$

$$\Delta V_{OC} = k_{OC} \Delta u_s,$$

то:

$$\Delta \dot{a} = -c_a \Delta a + c_p \Delta p - c_u \frac{c_{au}}{1 + c_{ou} k_{OC}} \Delta a$$

або:

$$\Delta \dot{a} + \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 + c_{ou} k_{OC}} \right) \Delta a = c_p \Delta p.$$

Переходячи до зображень за Лапласом, отримуємо:

$$(T_{A-} s + 1) \Delta a = k_{A-} \Delta p,$$

де

$$T_{A-} = \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 + c_{ou} k_{OC}} \right)^{-1};$$

$$k_{A-} = c_p T_{A-} = c_p \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 + c_{ou} k_{OC}} \right)^{-1}.$$

У нормальній формі Коші відповідні співвідношення матимуть вигляд:

$$\Delta \dot{a} = - \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 + c_{ou} k_{OC}} \right) \Delta a + c_p \Delta p;$$

$$\Delta u_s = \left(\frac{c_{au}}{1 + c_{ou} k_{OC}} \right) \Delta a$$

або:

$$\dot{x}_1 = a_{11} x_1 + b_1 u;$$

$$y = c_1 x_1,$$

де

$$a_{11} = - \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 + c_{ou} k_{OC}} \right);$$

$$c_1 = \frac{c_{au}}{1 + c_{ou}k_{OC}};$$

$$b_1 = c_p;$$

$$x_1 = \Delta a;$$

$$u = \Delta p;$$

$$y = \Delta u_S.$$

Аналіз результатів. У випадку з позитивним жорстким зв'язком еквівалентну постійну часу визначають співвідношенням:

$$T_{A+} = \left(c_a + c_u \frac{c_{au}}{1 - c_{ou}k_{OC}} \right)^{-1}.$$

Якщо коефіцієнт зворотного зв'язку настільки малий, що задовольняє умову

$$1 - c_{ou}k_{OC} > 0,$$

то менші за одиницю значення цього виразу в знаменнику викликають збільшення вkladу відповідної складової і, як результат, зменшення постійної часу аж до нуля при значеннях коефіцієнта зворотного зв'язку

$$k_{OC} = 1/c_{ou}.$$

За більших значень коефіцієнта зворотного зв'язку, коли

$$\frac{1}{c_{ou}} < k_{OC} < \frac{1}{c_{ou}} + \frac{c_{au}c_u}{c_{ou}c_a},$$

постійна часу змінює знак на від'ємний, що вказує на те, що система набуває властивостей аперіодичної нестійкої ланки (система втрачає стійкість). Подальше зростання значень коефіцієнта зворотного зв'язку, так що

$$k_{OC} > \frac{1}{c_{ou}} + \frac{c_{au}c_u}{c_{ou}c_a}$$

викликає зворотну зміну знаку постійної часу на додатній, причому величина її вже монотонно зменшується від дуже великих значень до менших (теоретично до нуля). Очевидно, аналогічні трансформації відбуваються і з коефіцієнтом підсилення системи.

У випадку з негативним жорстким зв'язком еквівалентна постійна часу дається співвідношенням:

$$T_{A^-} = \left(c_a + \frac{c_{au}c_u}{1 + c_{ou}k_{OC}} \right)^{-1} =$$

$$= \frac{1 + c_{ou}k_{OC}}{c_a \left[1 + \frac{c_{au}c_u}{c_a} + c_{ou}k_{OC} \right]} = \frac{1}{c_a} \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{c_a}{c_{au}c_u}(1 + c_{ou}k_{OC})} \right)$$

і, очевидно, монотонно збільшується з ростом коефіцієнта зворотного зв'язку. Зрозуміло, що аналогічні трансформації відбуваються у цьому випадку і з коефіцієнтом підсилення системи.

Глава X

ОПТИМАЛЬНИЙ СИНТЕЗ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СЕНСОРІВ

РОЗДІЛ 1. ЗАГАЛЬНІ ПИТАННЯ ОПТИМАЛЬНОГО ПРОЕКТУВАННЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ СЕНСОРІВ

Основними напрямками поліпшення якості вимірювання парціального тиску активних газів напівпровідниковими сенсорами сьогодні є: 1) створення нових принципів підвищення селективності; 2) мініатюризація та стандартизація; 3) застосування засобів обчислювальної техніки та мікропроцесорів у комплексі з аналітичним приладом; 4) створення методик оптимізації аналітичних приладів за різними критеріями якості.

У широкому розумінні задача проектування аналітичних приладів зводиться до розв'язання групи питань, що належать або до аналізу, або до синтезу схем приладу з урахуванням режиму його роботи та умов експлуатації. Головна задача аналізу — отримати основні характеристики (статичні та динамічні) аналітичного приладу, і вона здебільшого виконана. Стосовно задач синтезу, то звичайно виділяють: 1) структурний синтез, тобто синтез структури аналітичного приладу; 2) параметричний синтез, тобто вибір параметрів структури проекту.

Власне оптимізацією називають оптимальний параметричний синтез. Він полягає у виборі в n -мірному просторі проектування χ такої допустимої точки $X(x_1, x_2, \dots, x_n)$ — вектора конструктивних параметрів аналітичного приладу, в якій досягається оптимальне значення критерію оптимальності — цільової функції.

Простір конструктивних параметрів χ — множина допустимих значень конструктивних параметрів $X \in \chi$. Він визначається верхньою і нижньою границею діапазону $x_{jD} \leq x_j \leq x_{jU}$, якщо параметр x_j — неперервна змінна; деяким набором можливих значень $x_j \in \{x_{j1} \dots x_{jkj}\}$, якщо параметр x_j — дискретна змінна. Як правило, множина допустимих значень конструктивних параметрів включає також співвідношення виду:

$$\varphi(X) \leq 0,$$

$$\psi(X) = 0,$$

які впливають:

а) з умов обмеженості ресурсів (енергетичних, фінансових тощо);

- б) із законів збереження (балансові обмеження);
- в) з вимог до конструкції чи проекту (функціональні, критеріальні обмеження).

Розв'язати задачу оптимального параметричного синтезу — означає вибрати деяку точку $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ у просторі χ конструктивних параметрів. Кожна точка X ($X \in \chi$) являє собою технічне рішення (альтернативний варіант). Відношення переваги, яке задане на множині χ , дає змогу вибрати із множини альтернатив χ найкращий варіант технічного рішення.

Набір вихідних параметрів $V_i, i = \overline{1, m}$ об'єкта проектування — це показники правильності функціонування об'єкта і рівня відповідності об'єкта своєму призначенню. На практиці це — метрологічні характеристики, продуктивність, надійність, ціна, маса, габарити тощо.

Проектувальник впливає на вихідні параметри $V_i, i = \overline{1, m}$ шляхом вибору конструктивних параметрів X :

$$V = V(X, Y), \quad (1)$$

де $V = (V_1, V_2, \dots, V_m)$ — вектор вихідних параметрів;

$Y = Y(Y_1, Y_2, \dots, Y_r)$ — вектор некерованих у даній постановці задач оптимального проектування конструктивних параметрів.

Як правило,

$$Y = Y_a \cup Y_b \cup Y_c, \quad (2)$$

де Y_a — фіксовані та детерміновані;

Y_b — випадкові величини із заданими параметрами функції розподілу;

Y_c — невідомі заздалегідь (задаються деякою областю можливих значень).

Обмеження \tilde{V}_i на вихідні параметри V_i називають умовами дієздатності. У множині $I = \{1, m\}$ вихідних параметрів виділяють дві підмножини:

I^+ — параметри, які бажано максимізувати (ККД, продуктивність, швидкодія, точність);

I^- — параметри, які бажано зменшувати (ціна, маса, споживана потужність).

Обмеження на вихідні параметри формулюються так:

$$V_i(X, Y) \geq \tilde{V}_i, \quad i \in I^+$$

$$V_i(X, Y) \leq \tilde{V}_i, \quad i \in I^- \quad (3)$$

Розрізняють обмеження \tilde{V}_i на вихідні параметри та рекордні V_{i0} значення вихідних параметрів, які можна дізнатися за допомогою опитування експертів у даній предметній області.

Рекордні V_{i0} значення вихідних параметрів:

$$\begin{aligned} V_{i0} &= \max_{x \in \chi} V_i(X), i \in I^+; \\ V_{i0} &= \min_{x \in \chi} V_i(X), i \in I^-. \end{aligned} \quad (4)$$

Тоді величина

$$Z_i(X) = 1 - \frac{V_i(X) - V_{i0}}{\tilde{V}_i - V_{i0}}, i = \overline{1, m} \quad (5)$$

являє собою «запас» у виконанні обмеження (3) по i -параметру, причому:

$Z_i = 0$ на границі області (при $V_i(X) = \tilde{V}_i$);

$Z_i > 0$ якщо виконується умова (3);

$Z_i = 1$ якщо досягнуто рекордних значень i -параметра $V_i(X) = V_{i0}$.

Таблиця 10.1

Постановка задач оптимального проектування

Обмеження, задані умови	Оптимізується (критерій ефективності, цільова функція)	Формула
Ресурс Q задано (вектор конструктивних параметрів)	Результат (ціль) R отримуваний (вектор вихідних параметрів) повинен бути максимальний ($\rightarrow \max$)	$F_1 = R \rightarrow \max_{Q \leq Q_0}$ $Q_0 = Q_{\text{задан}}$
Результат (ціль) R є задані (вектор вихідних параметрів)	Використані ресурси (вектор конструктивних параметрів) повинні бути мінімальні ($\rightarrow \min$)	$F_2 = Q \rightarrow \min_{R \geq R_0}$ $R_0 = R_{\text{задан}}$

Як правило, мета задачі оптимального проектування — вибрати варіант вектора конструктивних параметрів, який найкраще задовольняє умові дієздатності. Тоді задача оптимізації має вигляд:

$$W(X) = \min_{1 \leq i \leq m} \alpha_i Z_i(X) \rightarrow \max_{X \in \chi} \quad (6)$$

де α_i — додатні коефіцієнти, що відображають неоднакову важливість i -параметра V_i .

Менші значення коефіцієнтів α_i відповідають більшій важливості параметра V_i , причому:

$$\alpha_i \in \{1, \dots, M\}, M \gg 1, i = \overline{1, m}. \quad (7)$$

Практично тут деякий вихідний параметр V_i^* вибирають як такий, що оптимізується (є цільовою функцією), а обмеження на всі інші вихідні параметри вводять в опис простору конструктивних параметрів χ , який тепер позначають як χ^* .

Обґрунтування правильності знайденого рішення. Вважається, що достовірність рішення має бути підтверджена кількісним і якісним аналізом, а також можливістю його інтерпретації в застосуванні до реальних умов. Рішення оптимізаційної задачі приймають за правильне та обґрунтоване, якщо йому відповідає деякий реальний стан системи, та якщо це рішення є оптимумом цього стану.

Усі моделі вірні лише у певних межах, усі залежності справедливі в деяких границях, а вся інформація має обмежену точність. А тому перевіряють, чи не виходить отриманий розв'язок за границі достовірності моделі? Якщо таке виявлено, то необхідно ввести у модель додаткові обмеження і повторити розрахунки.

Стратегії оптимізаційного дослідження. Існує [2] загальна методологія розв'язання задач проектування, основана на застосуванні спрощених, легко розв'язуваних моделей для пояснення трендів в деталізованих оптимізаційних розрахунках. Методологія рекомендує: 1) спростити модель так, щоб можна було застосовувати прості алгебраїчні методи; 2) отримати на допоміжній моделі оптимальний розв'язок як функцію головних змінних моделі; 3) на основі допоміжної моделі побудувати ряд прогнозів і перевірити їх на повній моделі; 4) виявити основні причини, що впливають на розв'язок і криються за математичною складністю; 5) якщо оптимізаційні розрахунки підтверджують тренди, отримані на допоміжних моделях, то властивості моделі в певній мірі пояснено.

Досліджують кілька допоміжних моделей, кожна з яких відображає деякі з основних факторів або властивостей повної моделі. Основним результатом розв'язання проміжних задач є краще розуміння фізичного змісту отриманого оптимального рішення. Інтерпретація отриманого результату і розуміння того, чому дане рішення є оптимальним — важливий крок в оцінці правильності розв'язання. Для того, щоб довіряти рішенням, потрібно на якісному чи інтуїтивному рівні розуміти причини — чому змінні задачі отримали у розв'язку саме такі значення.

РОЗДІЛ 2. АНАЛІЗ ВПЛИВУ ТИПУ МАКРОСТРУКТУРИ МАТЕРІАЛУ ЧУТЛИВОГО ЕЛЕМЕНТУ ТА ЇЇ ХАРАКТЕРИСТИЧНИХ РОЗМІРІВ НА МЕТРОЛОГІЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЕНСОРІВ

Досліджено вплив типу макроструктури матеріалу та її характеристик розмірів на метрологічні характеристики сенсорів — чутливість та діапазон вимірювання. Порівнювалися властивості матеріалу за відсутності та наявності потенціальних бар'єрів у напрямку перенесення носіїв заряду. В обох випадках характеристики істотно залежать від значення параметра χ^2 . За своєю фізичною суттю, як це впливає з отриманого рішення [5], він визначається відношенням товщини плівки до ширини збіднюючого шару ОПЗ в даному матеріалі при $u_s = 1$, і дорівнює за величиною найбільшому значенню безрозмірного потенціального бар'єра, за якого все ще $u_o = 0$ (рис. 10.1) [5].

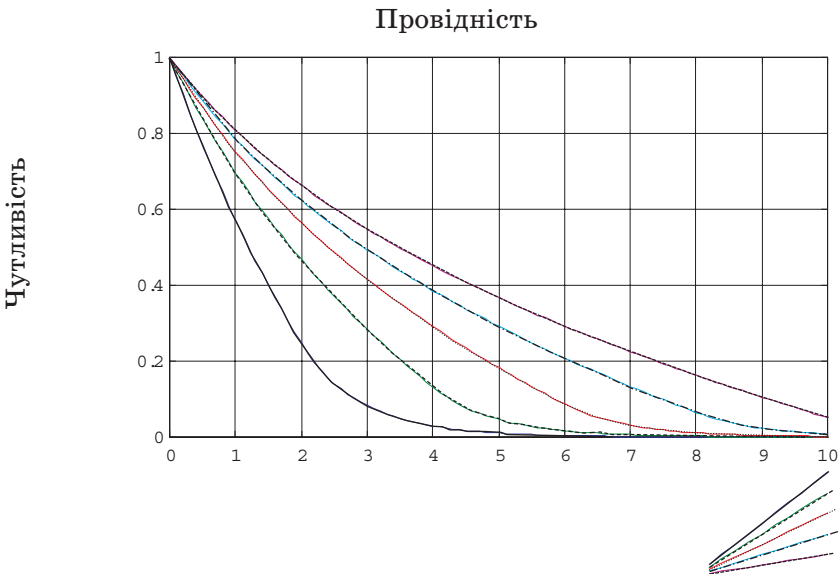


Рис. 10.1. Залежність відносної провідності тонкої монокристалічної плівки від величини поверхневого потенціального бар'єра для напівпровідника n -типу провідності та збіднюючого вигину зон

Аналітичне співвідношення для цього параметра має вигляд:

$$\chi^2 = \frac{h^2 q^2 n_i^0 T^{1/2} \exp(-E_G / 2kT)}{2[\pm(\lambda - \lambda^{-1})] \epsilon \epsilon_0 k}.$$

Відносна зміна його з температурою дається залежністю:

$$\delta\chi^2 = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{1/2} \frac{(\lambda - \lambda^{-1})}{(\lambda_0 - \lambda_0^{-1})} \exp\left(\frac{E_G}{2k}\left(\frac{1}{T_0} - \frac{1}{T}\right)\right).$$

ЧЕ без потенціальних бар'єрів у напрямку переносу носіїв заряду. Бачимо, що за товщини шару ОПЗ меншій, ніж товщина h плівки, чутливість по провідності слабо залежить від відповідної зміни поверхневого потенціального бар'єра u_s . Зі зменшенням характеристичного розміру чутливість істотно зростає і, при досягненні співвідношення $h = L_{ef}$, стає рівною одиниці та зростає далі зі зростанням відношення L_{ef}/h . Таким чином, залежно від конкретного матеріалу, рівень легування, з одного боку, та товщина шару h , з іншого, слід вибирати так, щоб величина (критерій χ^2) задовольняла умову $\chi^2 \leq 1$.

Окрім цього, для кожного значення параметра χ^2 падіння чутливості по провідності до зміни поверхневого потенціального бар'єра в області виснаження розпочинається за таких його значень, які відповідають проникненню поля на глибину, що дорівнює характеристичному розміру елемента структури ЧЕ (тобто при $h = L_{ef}$). Цим якраз і визначається верхня межа діапазону при вимірюванні парціального тиску акцепторного газу за допомогою напівпровідникового ЧЕ n -типу провідності і нижній — при вимірюванні парціального тиску донорного (чи відновлювального) газу за допомогою напівпровідникового ЧЕ p -типу провідності. Для випадку виснаженого шару цю умову в аналітичній формі записують так:

$$\chi^2 - u_s \geq 0. \quad (1)$$

Особливістю цього типу структури є те, що в точці переходу від області збагачення до області збіднення і навпаки, чутливість практично не змінюється і для n -напівпровідника за повної іонізації примісних центрів в об'ємі дорівнює:

$$S_G|_{u_s \rightarrow 0} = \lim_{u_s \rightarrow 0} \left(\frac{L_{ef}}{h} \frac{e^{-u} - 1}{\sqrt{e^{-u} + u - 1}} \right) \approx$$

$$\approx \lim_{u_s \rightarrow 0} \left(\frac{L_{ef}}{h} \frac{1 - u + \frac{u^2}{2!} + \dots - 1}{\sqrt{1 - u + \frac{u^2}{2!} + \dots + u - 1}} \right) \approx -\frac{L_{ef}}{h} \sqrt{2}.$$

Відповідна нижня межа діапазону вимірювання парціального тиску акцепторного газу (верхня — донорного чи відновлювального) металоокисним ЧЕ n -типу провідності або верхня межа діапазону вимірювання парціального тиску донорного чи відновлювального газу (нижня — акцепторного чи окислювального) металоокисним ЧЕ p -типу провідності визначається у цьому випадку досягненням рівня Фермі на поверхні положення, яке викликає виродження електронно-діркового газу (див. рис. 10.1). Аналітично цю умову записують так:

$$|u_S| \leq \frac{E_c - E_F - 2,3kT}{kT} \quad (2)$$

для n -типу, і

$$|u_S| \leq \frac{E_F - E_v + 2,3kT}{kT} \quad (3)$$

для p -типу напівпровідника. Ці співвідношення можуть бути переписані у вигляді:

$$u_S - u_B + 0,5E_G/kT - 2,3 \geq 0 \quad (4)$$

та

$$u_B - u_S - 0,5E_G/kT - 2,3 \geq 0 \quad (5)$$

відповідно.

Резюмуючи сказане, можна зробити висновок, що діапазон вимірювання парціального тиску компонент газових сумішей можна розширити за рахунок створення таких умов на поверхні елемента структури ЧЕ, щоб на одній з меж діапазону вимірювання реалізовувались умови збагачення, тоді як на іншій — збіднений шар — досягав граничного значення, за якого ще можливо забезпечити достатню чутливість. Як уже зазначалося, таку граничну величину визначають співвідношенням $(h/L_{ef})^2$.

Таким чином, зменшення характеристичного розміру структури при заданому рівні легування і заданій робочій температурі, викликаючи підвищення чутливості, приводить, однак, до звуження діапазону вимірювання. Тобто між діапазоном вимірювання і чутливістю наявна антибатна залежність. Формально (як це впливає зі співвідношення (4.3.23) чутливість до зміни

поверхневого потенціального бар'єра u_s за рахунок зменшення параметра χ^2 може досягти будь-якої величини. Насправді ж це не так, оскільки тут вступає у силу ряд факторів: 1) при розробленні моделі припускалася можливість застосування уявлень, розвинутих для масивних зразків — а це накладає обмеження «знизу» на розмір матеріалу порядку 200 Å; 2) технологічні можливості отримання плівок з неостровковою структурою обмежені товщинами 300–400 Å; 3) зменшення товщини плівки викликає прояв різних розмірних ефектів (в окремому випадку — осциляцію провідності та інших кінетичних характеристик, якщо товщина досягає значень де-Бройлевської довжини хвилі носія заряду).

Залежно від конкретної задачі, перераховані обставини обмежують мінімально можливу товщину елементів структури.

ЧЕ з полікристалічною структурою. Відповідно до викладеного у розділі 5.1, зрозуміло, що:

1) для забезпечення функціонування полікристалічного ЧЕ на міжзеренних межах повинен бути сформований збіднений шар, а процес переносу носія заряду повинен відбуватися за механізмом термоелектронної емісії;

2) нижню межу діапазону вимірювання визначають виконанням нерівності:

$$\sigma_{S1} + \sigma_{S2} + 2 \sigma_{S3} + \sigma_V \gg \sigma_{S4}. \quad (6)$$

Зупинимося на обґрунтуванні останнього положення більш детально. Результати моделювання впливу геометричного фактора для матеріалу з потенціальними бар'єрами представлені на рис. 10.3, де показано профіль розподілу потенціалу по геометричному перерізу зерна прямокутної форми n -типу провідності за відсутності поверхневого легування за різного співвідношення його товщини h та довжини a відповідно.

Результати моделювання ефектів, пов'язаних з поверхневим легуванням, показано на рис. 10.2. *г*. Вважалося, що на міжфазні границі нанесено мікродомішки речовини, яка формує на поверхні елемента структури ЧЕ шари збагачення основними носіями заряду. Причому збагачуючий вигин зон на бокових поверхнях може як не перевищувати за величиною різницю $E_C - E_F$, так і досягати значень, що забезпечують локально виродження електронно-діркового газу (рис. 10.2. *г*). Як бачимо, товщина у цих випадках практично вилучається з переліку факторів, що обмежують діапазон вимірювання. Нерівність (2) виконується тут

завідомо. Крім того, у першому наближенні, а в ряді випадків і з достатньою для практики точністю, розрахунки можна виконувати у межах одновимірної постановки задачі.

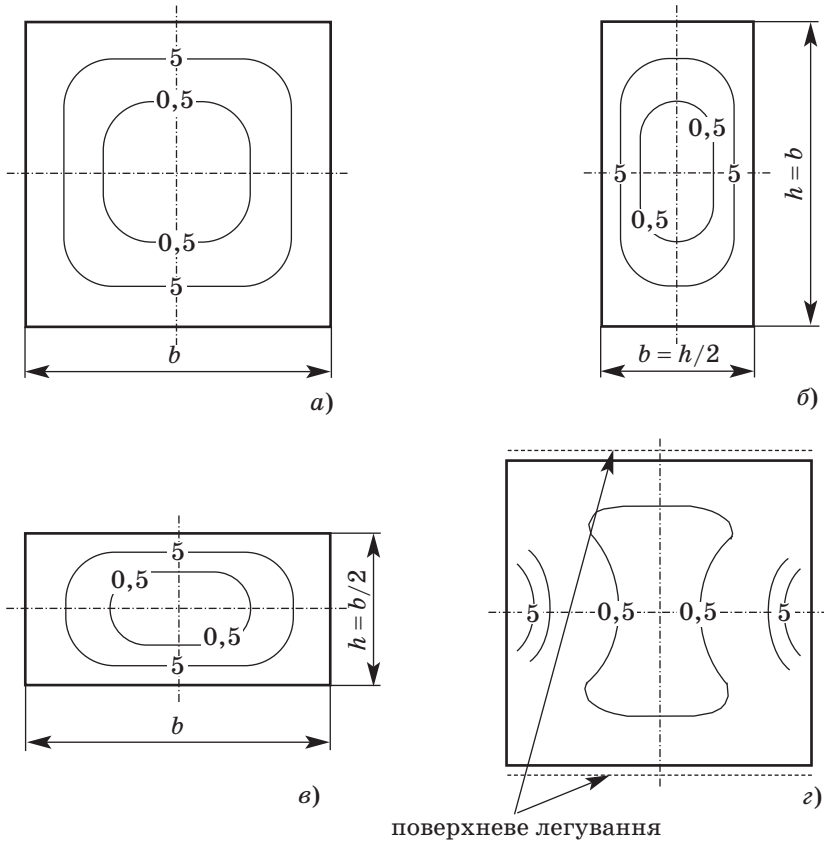


Рис. 10.2. Розподіл потенціалу в поперечному перерізі мікросталі за різного співвідношення висоти та ширини (а, б, в), а також за наявності на внутрішній та зовнішній поверхнях речовини, що викликає збагачуваний вигин зон (г)

Залежність опору від величини u_s зображено на рис. 10.3. Як бачимо, високе зерно більш вигідне з точки зору розширення діапазону вимірювання, тоді як чутливість від товщини зерна не залежить. Це є принциповою особливістю полікристалічної структури.

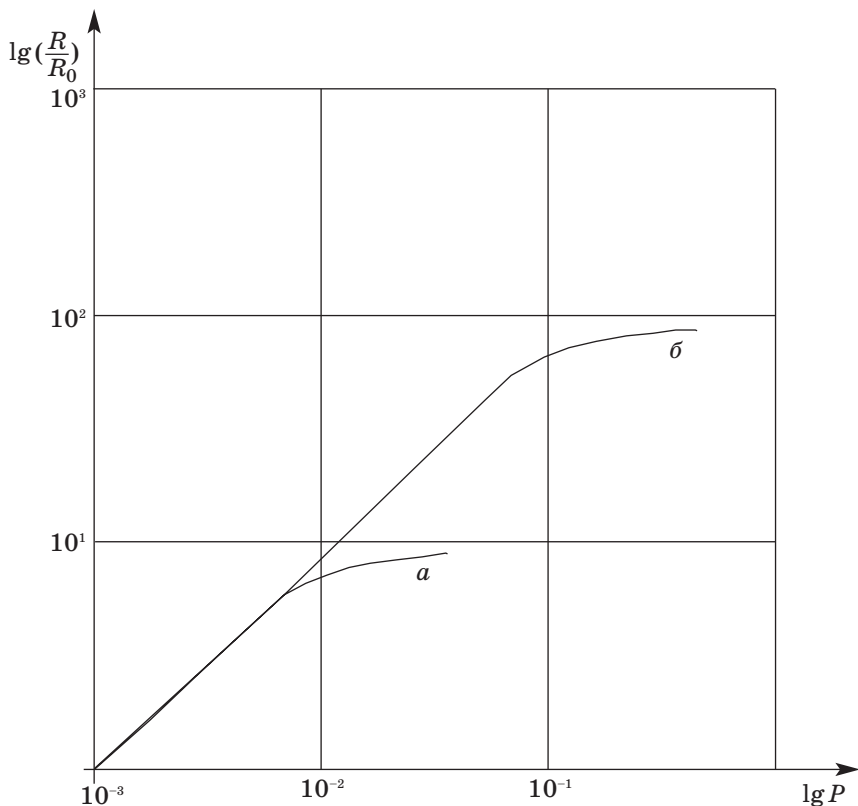


Рис. 10.3. Вплив анізотропного поверхневого легування на діапазон вимірювання: *a* — нелегований, *б* — легований зразки

Аналіз впливу розмірних ефектів у випадку збіднення поверхні основними носіями заряду на явища переносу заряду в полікристалічних зразках може бути виконаний одночасно з аналізом їх впливу на динаміку перехідних процесів. Будемо допускати, як це робиться і в [4], що положення енергетичних зон в об'ємі кристаліта при $u_S = 0$ характеризує запас носіїв струму, що переносяться з об'єму на поверхню (як для участі у поверхневій реакції, так і для переносу заряду вздовж структури), тоді як положення зон на поверхні визначає величину бар'єра, який їм необхідно здолати для участі у цих процесах. Дopusкаємо також, що електрони долають потенціальний бар'єр по механізму термоелектронної емісії. Тобто як константа швидкості захоплення, так і опір перенесенню носіїв заряду

будуть пропорційні експоненційному множнику, де різниця і визначає висоту потенціального бар'єра. Отже, відповідно до отриманого співвідношення (1) при досягненні потенціальним бар'єром величини χ^2 відбувається, по суті, відключення впливу поверхні на величину опору зразка. Цією обставиною і визначається наявність верхньої межі вимірювання акцепторного газу металоокисним полікристалічним ЧЕ n -типу провідності, і нижнього — при вимірюванні парціального тиску донорного (відновлювального) газу. Відповідні нижня і верхня межі діапазону вимірювання у цьому випадку визначаються виконанням умов (6) та (1).

Аналогічні ситуації мають місце і для шарів збіднення на полікристалі p -типу провідності. Однак, якщо для ідеальних структур величина χ^2 повинна бути близькою до одиниці, то у випадку полікристалічних зразків дане обмеження відсутнє. А тому можлива ситуація, коли u_s досягає значення, за якого швидкість захоплення стає дуже малою і тільки цією обставиною обмежується відповідна границя діапазону вимірювання.

РОЗДІЛ 3. ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ МЕТАЛООКИСНОГО ЧУТЛИВОГО ЕЛЕМЕНТУ ЗА КРИТЕРІЄМ МАКСИМУМУ ЧУТЛИВОСТІ

Формалізований запис задачі оптимального проектування напівпровідникових сенсорів газу з метою максимізації чутливості вихідного сигналу до варіацій парціального тиску вимірюваного газу в термінах формалізму зонної моделі твердого тіла можна представити у такому вигляді:

$$\frac{\partial u_s}{\partial p_{k_0}} \Rightarrow \max,$$

за таких умов:

$$\Phi(p, u_s, u_B) = N_t^{XC}(p, u_s, u_B) + N_t^B(u_s, u_B) + N_{SC}(u_s, u_B) = 0;$$

$$\rho_v(u_B) = p(u_B) - n(u_B) + \sum_{r=1}^v c_r \cdot SD_r(u_B) = 0;$$

$$\left\| \frac{\partial u_s}{\partial p_{k_0}} \right\| - \frac{\partial u_s}{\partial p_{k_0}} \geq 0; \quad k \neq k_0, \quad k = \overline{1, w_1};$$

$$\sum_{k=1}^{w_1} p_k = p_{atm};$$

$$u_S - u_B + 0,5E_G / kT - 2,3 \geq 0; \text{ для } N\text{-H/II};$$

$$u_B - u_S - 0,5E_G / kT - 2,3 \geq 0; \text{ для } P\text{-H/II};$$

$$\|p_k\| - p_k \geq 0; k = \overline{1, w_1};$$

$$\|N_{A\alpha}^S\| - N_{A\alpha}^S \geq 0;$$

$$\|N_{D\alpha}^S\| - N_{D\alpha}^S \geq 0; \alpha = \overline{w_1, w};$$

$$\|N_{Ar}\| - N_{Ar} \geq 0;$$

$$\|N_{Dr}\| - N_{Dr} \geq 0; r = \overline{1, v};$$

$$x_i \geq 0; i = \overline{1, n},$$

де

$$q^{-1}Q_{SS}^{XC}(u_S, u_B) = \sum_{\alpha=1}^{w_1} \{N^* SD_{\alpha}(u_S) [1 - \sum_{\ell \neq \alpha}^w \theta_{\ell}] / [1 + (D_{\alpha}(u_S) b_{\alpha} p_{\alpha})^{-1}]\};$$

$$q^{-1}Q_{SS}^B(u_S, u_B) = \sum_{\alpha=w_1+1}^w \{SD_{\alpha}(u_S) N_{\alpha}\};$$

$$Q_{SC}(u_S, u_B) = \chi \beta^{-1} \ell_D^{-1} F(u_S, u_B);$$

$$\frac{\partial u_S}{\partial p_k} = - \frac{\frac{\partial}{\partial p_k} Q_{SS}^{XC}(u_S, u_B)}{\frac{\partial}{\partial u_S} Q_{SS}^{XC}(u_S, u_B) + \frac{\partial}{\partial u_S} Q_{SS}^B(u_S, u_B) + \frac{\partial}{\partial u_S} Q_{SC}(u_S, u_B)};$$

$$F(u_B, u_S) = \text{sign}(u_S) \varphi(u_B, u_S)^{1/2};$$

$$\varphi(u_B, u_S) = 2[ch(u_B - u_S) - ch(u_B)] + \sum_{r=1}^v J_r(u_B, u_S);$$

$$j_r(u_B, u_S) = c_r \ln \left\{ \sum_{\ell=n_{\alpha}^-}^{n_{\alpha}^+} [\exp(\ell u_S) f_{r\ell}(u_B)] \right\};$$

$$n(u_B) = \delta n_i \exp(u_N + u_B - u);$$

$$\begin{aligned}
 p(u_B) &= \delta^{-1} n_i \exp(-u_p - u_B + u), u = 0; \\
 u_B &= (E_F - E_i) u_T^{-1}; \\
 u_S &= (\Psi_0 - \Psi_S) \beta; \\
 u_T &= kT.
 \end{aligned}$$

Тут символом норми $\|\cdot\|$ позначені гранично допустимі значення параметрів моделі.

РОЗДІЛ 4. ОПТИМІЗАЦІЯ МЕТРОЛОГІЧНИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕТАЛООКИСНОГО ЧУТЛИВОГО ЕЛЕМЕНТУ ЗА КРИТЕРІЄМ МАКСИМУМУ СЕЛЕКТИВНОСТІ

Формалізований запис задачі оптимального проектування напівпровідникових сенсорів газу з метою максимізації селективності вихідного сигналу до варіацій парціального тиску вимірюваного газу в термінах формалізму зонної моделі твердого тіла, використовуючи результати попередніх глав, можна представити у такому вигляді:

$$\sum_{k \neq k_0}^{w_1} \frac{\partial u_s}{\partial p_k} \Rightarrow \min,$$

за таких умов:

$$\Phi(p, u_S, u_B) = N_t^{XC}(p, u_S, u_B) + N_t^B(u_S, u_B) + N_{SC}(u_S, u_B) = 0;$$

$$\rho_v(u_B) = p(u_B) - n(u_B) + \sum_{r=1}^v c_r \cdot SD_r(u_B) = 0;$$

$$\sum_{k=1}^{w_1} p_k = p_{atm};$$

$$\frac{\partial u_s}{\partial p_{k_0}} \geq S_0;$$

$$u_S - u_B + 0,5E_G / kT - 2,3 \geq 0; \text{ для N-н/п;}$$

$$u_B - u_S - 0,5E_G / kT - 2,3 \geq 0; \text{ для P-н/п;}$$

$$\|p_k\| - p_k \geq 0; k = \overline{1, w_1};$$

$$\begin{aligned} & \|N_{A\alpha}^S\| - N_{A\alpha}^S \geq 0; \\ & \|N_{D\alpha}^S\| - N_{D\alpha}^S \geq 0; \quad \alpha = \overline{1, w}; \\ & \|N_{Ar}\| - N_{Ar} \geq 0; \\ & \|N_{Dr}\| - N_{Dr} \geq 0; \quad r = \overline{1, v}; \\ & x_i \geq 0, \quad i = \overline{1, n}, \end{aligned}$$

де всі параметри визначаються тими ж співвідношеннями, що і в попередньому розділі.

Обговорення питань практичної реалізації обчислень представлених формулювань оптимізаційних задач виходить за межі даного дослідження. Відзначимо тут лише основні етапи [2] підготовки моделі до розв'язання:

- 1) вирішення обчислювальних проблем шляхом модифікації моделі;
- 2) підвищення ефективності рішення шляхом перетворення моделі;
- 3) знаходження ознак можливих рішень задачі на основі аналізу специфічних особливостей моделі.

Передчасне закінчення обчислень як обчислювальну проблему спричинюють:

- 1) погане масштабування змінних;
- 2) невідповідність програм для обчислення значень функцій та програм для обчислення похідних;
- 3) неможливість визначення похідних від функцій моделі;
- 4) невірне задання області визначення значень аргументів функцій.

Складність розв'язання оптимізаційних задач експоненційно зростає зі збільшенням кількості змінних або кількості обмежень у вигляді рівнянь та нерівностей. Ефективність розв'язання можна поліпшити за допомогою:

- 1) перетворень функцій та змінних;
- 2) виключенням зайвих обмежень;
- 3) застосуванням методу послідовної підстановки.

Визначення специфічних особливостей задачі, що впливають на процес пошуку оптимуму, на основі аналізу отриманої в результаті такої адаптації моделі, є заключним етапом підготовки задачі до розв'язання. А саме визначення:

- 1) випуклості;

- 2) необмеженості області допустимих рішень;
- 3) наявності єдиного розв'язку;
- 4) існування допустимого рішення.

Обидві постановки задачі оптимізації напівпровідникового сенсора газу (як за критерієм максимуму чутливості, так і за критерієм максимуму селективності) істотно невишуклі. Обчислювач повинен враховувати можливість існування кількох локальних рішень, менш широкий вибір класів алгоритмів для пошуку оптимуму, можливість проблем зі збіжністю обчислювального процесу.

Звичайно, сама по собі невишуклість не обов'язково вказує на існування кількох локальних мінімумів. Неєдиність рішення витікає, як правило, із самої моделі, а не є природною властивістю реальної системи. Підтвердити неєдиність рішення, знайти всі локальні мінімуми можна лише у процесі розв'язування.

ВИСНОВКИ

Таким чином, представлена частина основних результатів роботи, виконаної авторами у 80-ті роки у підрозділах приладобудівного факультету НТТУ «КПІ» в межах вирішення питань аналізу та синтезу напівпровідникових сенсорів газу, температури та сонячних елементів.

ЛИТЕРАТУРА

1. Айцингер. Развитие физических моделей варисторов на основе ZnO // Поликристаллические полупроводники. — М. : Мир, 1989. — 344 с.
2. Блаттер Г., Грюттер Ф. Электрические свойства межзеренных границ в присутствии глубоких объемных ловушек // Поликристаллические полупроводники. — М. : Мир, 1989 — 344 с.
3. Блекмор Дж. Статистика электронов в полупроводниках. — М. : Мир, 1964. — 392 с.
4. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. — М. : Наука, 1977.
5. Бонятовский А. Электронные состояния межзеренных границ в полупроводниках // Поликристаллические полупроводники. — М. : Мир, 1989. — 344 с.
6. Бургуэн Ж., Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках: теоретические аспекты : пер. с англ. — М. : Мир, 1985. — 297 с.
7. Бургуэн Ж., Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках: экспериментальные аспекты : пер. с англ. — М. : Мир, 1985. — 304 с.
8. Вест А. Химия твердого тела. Теория и приложение : в 2-х ч., пер. с англ. — М. : Мир, 1988. — 558 с.
9. Волькенштейн Ф. Ф. Электронные процессы на поверхности полупроводников при хемосорбции. — М. : Наука, 1987. — 432 с.
10. Грибников З. С., Саченко А. В., ФТП, 1976. — Т. 10, № 2. — С. 304–309.
11. Ихомура К. Применение спеченной окиси олова в газовых детекторах // NTG-Fachberichten. — 1982, n. 19. — P. 312–317.
12. Кофстад П. Отклонение от стехиометрии, диффузия и электропроводность в простых окислах металлов. — М. : Мир, 1969. — 654 с.
13. Кофстад П. Отклонение от стехиометрии, диффузия и электропроводность в простых окислах металлов. — М. : Мир, 1975. — 396 с.
14. Крегер Ф. Химия несовершенных кристаллов. — М. : Мир, 1969. — 654 с.
15. Милнс А. Примеси с глубокими уровнями в полупроводниках. — М. : Мир, 1977. — 562 с.

16. Оябу Т., Огава Т., Куобе Т. Характеристики чувствительности полупроводникового газочувствительного элемента, полученного методом трафаретной печати // Денси цусин гаккай робибуни, 1982. — Т. 65. — № 8. — С. 615–621.

17. Пека Г. П., Стриха В. И. Поверхневі та контактні явища у напівпровідниках. — К. : Либідь, 1992. — 240 с.

18. Пека Г. П. Физика поверхности полупроводников. — К. : Изд-во киев. ун-та, 1967. — 197 с.

19. Ржанов А. В. Электронные процессы на поверхности полупроводников. — М. : Наука, 1971. — 408 с.

20. Саченко А. В. Теория поверхностных неравновесных электронных процессов в полупроводниках // Проблемы физики поверхности полупроводников. — К. : Наукова думка, 1981. — 322 с.

21. Шкловский Б. И., Эфрос Ф. Ф. Электронные свойства легированных полупроводников. — М. : Наука, 1979.

22. Штресслер С., Райс А., Визер Д. Электрические свойства оксидов в условиях окисления, восстановления и катализа // Поликристаллические полупроводники. — М. : Мир, 1989. — 344 с.

23. Derniarne V., Grisel A. On integrated low-power thin films CO gas sensors on silikon // Sensor & actuators, № 6. — P. 321–327.

24. Egashira M., Jochida J., Kawasumi S. Gas sensors of thin oxid whiskers // Sensor & actuators. — 1986. — V. 2. — № 9. — P. 147–155.

25. Garrett C. G. B., Brattain W. H. Physycal theory of semiconductor surfaces. — Phys. Rev., 1955, 99, № 2. — P. 376–387.

26. J. Bonnet, L. Soonckindt, j. M. Polan. Barrier de surface d'un semiconductouren fonction de la temperatute dans le cas de distributions complexes d'etals. Calcul etexploitation. J. Physicue. 1984, 45, № 7. — P. 1197–1211.

27. Jen Chwen Lin, T. Leo Ngai, Y. Austing Chang. Thermodynamic properties and defect structure of semiconducting compound phases : tin telluride. Metalurgical transactions. A. v. 17A, july, 1986. — P. 1241–1245.

28. J. Malenda, A. Stokloss, W. Znamirovski. Transport properties of ferrous oxide Fe_2O_3 of high temperature. Phys. stat. sol. (b), 142, 517 (1987).

29. Logotetis A. D., Brailsford E. M. On steade-state diffusion model for solid-state Gas Sensors // Sensor & actuators. 7(1985). — P. 39–57.

30. Morrison S. R. Mechanism of semiconductor gas sensor operation // *Sensors & actuators*. 11(1987). — P. 283–287.
31. Morrison S. R. Selectivity in semiconductor gas sensors // *Sensors & actuators*. 12(1987). — P. 425–440.
32. Morrison S. R. *The Chemical Physics of Surfaces*. — Plenum Press, 1977.
33. Sung Ho Park, Jac Chi Hcoi. A study of nonstoichiometry and electrical conductivity of erbium sesquioxide. *J. phys. chem. solids*, 1987. — V. 48. — № 8. — P. 733–737.

Глава I

1. Абалкин И. В., Четвертушкин Б. Н. Кинетически согласованные разностные схемы как модель для описания течений умеренно-разреженных газов / Математическое моделирование, 1993. — Т. 5. — № 5. — С. 61–70.
2. Абрамов И. И. Численное моделирование полупроводниковых приборов. — М. : Наука, 1991. — 286 с.
3. Андрoadис Д. Диффузия в кремнии // МОП-СБИС. Моделирование элементов и технологических процессов. — М. : Радио и связь, 1988. — 496 с.
4. Берд А. Молекулярная газовая динамика. — М. : Мир, 1986. — 365 с.
5. Бубенников А. Н. Моделирование интегральных микротехнологий, приборов и схем. — М. : Высшая школа, 1989. — 320 с.
6. Веников В. А. Теория подобия и моделирования. — М. : Наука, 1976. — 257 с.
7. Волькенштейн Ф. Ф. Электронная теория катализа на полупроводниках. — М. : Физматгиз, 1960. — 187 с.
8. Волькенштейн Ф. Ф. Физико-химия поверхности полупроводников. — М. : Наука, 1973. — 399 с.
9. Гиббс Дж. В. Термодинамические работы / пер. с англ. — М. : Гостехиздат, 1950. — 421 с.
10. Кофстад П. Отклонение от стехиометрии, диффузия и электропроводность в простых окислах металлов. — М. : Мир, 1975. — 396 с.
11. Краснощеков П. С., Петров А. А. Принципы построения моделей. — М. : Изд-во МГУ, 1983. — 264 с.
12. Крылов О. В., Киселев В. Ф. Катализ переходными металлами и их оксидами. — М. : Наука, 1986. — 291 с.
13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. — М. : Наука, 1967. — 460 с.

14. Мороз А. С. Математическая модель полупроводникового измерительного преобразователя парциальных давлений компонент газовых сред сложного состава // Сварка тугоплавких металлов и сплавов : сб. науч. тр. — К. : ИЭС им. Е. О. Патона, 1986. — С. 68.

15. Моррисон С. Р. Химическая физика поверхности полупроводников. — М. : Мир, 1983.

16. О зависимости электропроводности поликристаллической тонкой пленки от давления кислорода / А. С. Мороз, П. М. Таланчук / УФЖ, 1985. — Т. 30. — № 12. — С. 1987–1994.

17. Окутюрье М. Сегрегация на межзеренных границах. Зернограничная диффузия // Поликристаллические полупроводники. — М. : Мир, 1989. — 344 с.

18. Польский Б. С. Численное моделирование полупроводниковых приборов. — Рига: Зинатне, 1986. — 168 с.

19. Поно Р. Геометрия протяженных граничных дефектов в полупроводниках // Поликристаллические полупроводники. — М. : Мир, 1989. — 344 с.

20. Робертс М., Маки Ч. Физическая химия поверхности раздела металл-газ. — М. : Мир, 1981. — 368 с.

21. Садовский В. Н. Основания общей теории систем : логико-методологический анализ. — М. : Наука, 1974. — 279 с.

22. Советов Б. Я., Яковлев С. А. Моделирование систем. — М. : Высшая школа, 1985. — 271 с.

23. Таланчук П. М., Гаврилов Г. М., Фомин М. Н. Обобщенная математическая модель измерительных преобразователей с распределенными во времени и в пространстве параметрами // Химическая технология, 1985. — № 1. — С. 60–63.

24. Таланчук П. М., Мороз А. С., Мишта В. П. Математическая модель металлоокисного чувствительного элемента полупроводниковых датчиков концентрации газа и датчиков температуры. — К. : ГНТБ Украины, деп. рук. № 340-94. — 10 с.

25. Таланчук П. М., Мороз А. С., Мишта В. П. Математическая модель металлоокисного чувствительного элемента полупроводниковых датчиков концентрации газа и датчиков температуры. — К. : ГНТБ Украины, деп. рук. № 449-94. — 19 с.

26. Таланчук П. М., Рущенко В. Т. Основы теории и проектирования измерительных приборов. — К. : Вища школа, 1989. — 271 с.

27. Таланчук П. М., Фомин М. Н., Сергеев В. В. Моделирование и оптимизация на ЭВМ измерительных преобразователей. — К. : Вища школа, 1991. — 251 с.

28. Тонкие поликристаллические и аморфные пленки. Физика и применение // под ред. Казмерски Л. — М. : Мир, 1983. — 304 с.
29. Chez R. Surf. Sci. 326 (1970), 20.
30. Fisher J.C. Calculation of Diffusion Penetration Curves for Surface and Grain Boundari Diffusion // J. Appl. Phis. 1950. — V. 22. — P. 74–77.
31. Husimura R., Kurisu H., Okuda T. Interaction of CO with surfaces defect of MgO : a high vacuum ESR study // Surface science. 197(1988). — P. 444–456.
32. A. Jones, T. A. Jones, B. Mann, J. G. Firth. The effect of the physical form of the oxide on the conductivity changes produced by CH, CO and H O on ZnO // Sensors. actuators. 5(1984). — P. 75–99.
33. Jose A. Rodrigues, Charles T. Campbell. A quantum chemical study of adsorption of water, formaldehyde and ammonia on copper surfaces and water on ZnO(0001). Surf. science 197(1988). — P. 567–593.
34. Lanto V., Rompainen P. Electrical studies on the reactions of CO with different oxygen species on SnO surfaces. Surf. science. — 192(1987). — P. 243–264.
35. Morrison S. R. Selectivity in semiconductor gas sensors // Sensors & actuators. 12(1987). — P. 425–440.
36. Tsucada M., Shima N. Theory of Electronics Structures of Chemisorption on Oxid Surfaces. Phis. Chem. Minerals. (1987)15. — P. 35–40.

Глава II

1. Бонч-Бруевич В. Л., Калашников С. Г. Физика полупроводников. — М. : Наука, 1977.
2. Бургуэн Ж., Ланно М. Точечные дефекты в полупроводниках: экспериментальные аспекты / пер. с англ. — М. : Мир, 1985. — 304 с.
3. Волькенштейн Ф. Ф. Электронные процессы на поверхности полупроводников при хемосорбции. — М. : Наука, 1987. — 432 с.
4. Киреев П. С. Физика полупроводников. — М. : Высшая школа, 1975. — 584. — 4 с.
5. Мороз О. С. Тотожності зонних діаграм напівпровідникових структур. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 223-Ук2000. — 9 с.
6. Мороз О. С. Тотожності узагальненої статистики багатозарядних домішкових об'ємних центрів напівпровідникових матеріалів. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук2001. — 12 с.

7. Мороз О. С. Коэффициенты инжекции та экстракции носіїв заряду домішковими центрами в напівпровідниках. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 6 с.

8. Мороз О. С. Узагальнена статистика багатозарядних домішкових об'ємних центрів напівпровідникових матеріалів. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук2001. — 19 с.

9. Мулярчик С. Г. Численное моделирование микроэлектронных структур. — Мн. : Университетское, 1989. — 368 с.

10. Пека Г. П., Стріха В. І. Поверхневі та контактні явища у напівпровідниках. — К. : Либідь, 1992. — 240 с.

11. Таланчук П. М., Мороз О. С. Теорія напівпровідникових сенсорів газу: ч. І. Фізична хімія системи «газ-напівпровідник». — К. : УРД, 1997. — 60 с.

12. Шалимова К. В. Физика полупроводников. — М. : Энергия, 1976. — 416 с.

Глава III

1. Алексеев Б. В., Гришин А. М. Физическая газодинамика реагирующих сред. — М. : Высшая школа, 1985. — 464 с.

2. Антониадис Д. Диффузия в кремнии // МОП — СВИС. Моделирование элементов и технологических процессов / под ред. П. Антонетти и др. — М. : Радио и связь, 1988. — 486 с.

3. Бубенников А. Н. Моделирование интегральных микро-технологий, приборов и схем. — М. : Высшая школа, 1989. — 320 с.

4. Кофстад П. Отклонение от стехиометрии, диффузия и электропроводность в простых окислах металлов. — М. : Мир, 1975. — 396 с.

5. Мороз О. С. Коэффициенты инжекции та экстракции носіїв заряду поверхневими електронними станами в напівпровідниках. — К. : ДНТБУ, деп.рук. № 129-Ук01. — 6 с.

6. Мороз О. С. Тотожності узагальненої статистики багатозарядних домішкових поверхневих електронних станів у напівпровідниках. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 223-Ук2001. — 12 с.

7. Мороз О. С. Узагальнена статистика багатозарядних поверхневих електронних станів. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 224-Ук2000. — 19 с.

8. Мороз О. С. Фізична хімія поверхні напівпровідників. — К. : НТУУ «КПІ», 1999. — 60 с.

9. Окутюрье М. Сегрегация на межзеренных границах. Зернограничная диффузия / Поликристаллические полупроводники.

Физические свойства и применение / под ред. Г. Харбеке. — М. : Мир, 1989. — 344 с.

10. Робертс М., Маки Ч. Физическая химия поверхности раздела металл-газ. — М. : Мир, 1981. — 368 с.

11. Langmuir I. — J. Am. Chem. Soc., 1916. — V. 38. — P. 2217.

12. Morrison S. R. The Chemical Physics of Surfaces. — Plenum Press, 1977.

Глава IV

1. Гасанов Л. С. Распределение потенциала и свойства области пространственного заряда в обогащенных поверхностных слоях полупроводников : ч. I. Вычислительные системы. Сб. тр. Ин-та математики СО АН СССР. — Вып. 15, 1965 г.

2. Гасанов Л. С. Распределение потенциала и свойства области пространственного заряда в обедненных и инверсионных поверхностных слоях полупроводников : ч. II. Вычислительные системы : сб. тр. Ин-та математики СО АН СССР. — Вып. 15, 1965 г.

3. Мороз А. С., Кармадонов Н. И., Лендел В. В. Методика и программы расчета уровня легирования в простых окислах металлов. — ВИМИ, 1989. — Вып. 1, деп. рук. ND03361. — 25 с.

4. Мороз О. С. Перший інтеграл об'ємного заряду для рівняння Пуассона у випадку пластини напівпровідника з глибокими домішковими центрами. — К. : Деп. в ДНТБУ, № 129-Ук99. — 6 с.

5. Мороз О. С. Провідність монокристалічного шару напівпровідника субмікронних розмірів. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 12 с.

6. Мороз О. С. Розв'язок одновимірної крайової задачі у випадку бінарного напівпровідника з багатозарядними об'ємними домішковими центрами. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 12 с.

7. Мороз О. С. Розподіл потенціалу в напівпровідниковій пластині у випадку збіднення поверхні основними носіями заряду та у випадку малих вигинів зон. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук2001. — 12 с.

8. Ржанов А. В. Электронные процессы на поверхности полупроводников. — М. : Наука, 1971. — 408 с.

9. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. — М. : Наука, 1989. — 432 с.

10. Таланчук П. М., Мороз А. С., Мишта В. П., Рущенко В. Т. Решение одномерной краевой задачи для уравнения Пуассона в случае полупроводника с кратнoзарядными примесными центрами : ч. II. — К. : ГНТБ Украины, деп. рук. № 342-94. — 10 с.

11. Таланчук П. М., Мороз А. С. Решение одномерной краевой задачи для уравнения Пуассона в случае полупроводника с кратнорядными примесными центрами : ч. I. — К. : ГНТБ Украины, деп. рук. № 341-94. — 10 с.

12. Таланчук П. М., Мороз А. С. Решение одномерной краевой задачи для уравнения Пуассона в случае полупроводника с кратнорядными примесными центрами : ч. III. — К. : ГНТБ Украины, деп. рук. № 343-94. — 10 с.

13. Таланчук П. М., Мороз А. С., Смирнов А. Ю. Анализ статических характеристик моно- и поликристаллических газоанализаторов. — К. : УкрНИИНТИ, деп. рук. № 2054-Ук86. — 52 с.

14. Ruth Seiwith, Mino Green. Spase Charge calculations for Semiconductors journal of applied physics. — V. 29. — n. 7. — P. 1084–1040.

Глава V

1. Гуртов В. А. Сборник задач по физике поверхности полупроводников. — Петрозаводск, 1985. — 92 с.

2. Задачи по физике твёрдого тела / под ред. Г. Дж. Голдсмита. — М. : Наука, 1976. — 416 с.

3. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров : определения, теоремы, формулы / под общ. ред. И. Г. Аромяновича. — М. : Наука, 1984. — 831 с.

4. Мороз О. С. Изотерми хемосорбції простих ідеальних газів на поверхні напівпровідника. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 222-Ук2000. — 10 с.

5. Мороз О. С. Селективність напівпровідникових сенсорів газу : ідеальні гази. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 9 с.

6. Мороз О. С. Фізична хімія поверхні напівпровідника. — К. : НТУУ КПІ, 1999. — 60 с.

7. Мороз О. С. Чутливість напівпровідникових сенсорів газу : ідеальні гази. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 10 с.

8. Таланчук П. М., Мороз А. С., Смирнов А. Ю. Анализ статических характеристик моно- и поликристаллических газоанализаторов. — К. : УкрНИИНТИ, деп. рук. № 2054-Ук86. — 52 с.

9. Таланчук П. М., Мороз О. С. Теорія напівпровідникових сенсорів газу : ч. I. Фізична хімія системи «газ-напівпровідник». — К. : УРД, 1997. — 60 с.

Глава VI

1. Аладьев В. З., Гершгорн Н. А. Вычислительные задачи на персональном компьютере. — К. : Техника, 1991. — 245 с.

2. Бартенев О. В. Фортран для профессионалов. Математическая библиотека IMSL. — Диалог-МИФИ, 2000. — 448 с.
3. Белецки Я. Фортран 77 / пер. с польск. — М. : Высшая школа, 1991. — 207 с.
4. Бонч-Бруевич В. Л., Звягин И. П., Карпенко И. В., Миронов А. Г. Сборник задач по физике полупроводников. — М. : Наука, 1987. — 144 с.
5. Брич З. С., Капилевич Д. В., Клецкова Н. А. Фортран 77 для ПЭВМ ЕС : справ. изд. — М. : Финансы и статистика, 1991. — 288 с.
6. Горбунов-Посадов М. М. Конфигурации программ. Рецепты безболезненных изменений. — М. : Малип, 1993. — 192 с.
7. Лазарев Ю. Ф. MatLAB 5.x. — К. : Издат. груп. ВНУ, 2000. — 384 с.
8. Мартынов Н. Н., Иванов А. П. MatLAB 5.x. Вычисления, визуализация, программирование. — М. : КУДИЦ-ОБРАЗ, 2000. — 336 с.
9. Мороз О. С. Алгоритмічний інтерфейс до програмного комплексу «Графор». — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук2001. — 12 с.
10. Мороз О. С. Деякі питання організації та проведення обчислювального експерименту на алгоритмічній мові «Фортран». — К. : ДНТБУ, деп.рук. № 129-Ук2001. — 12 с.
11. Мороз А. С., Кармадонов Н. И., Лендел В. В. Методика и программы расчета уровня легирования в простых окислах металлов. — ВИМИ, 1989, вып. 1, деп. рук. ND03361. — 25 с.
12. Мороз О. С. Методика розрахунку поверхневого потенціалу в простих окислах металів. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 12 с.
13. Мороз О. С. Модифікована методика розрахунку рівня легування в простих окислах металів. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 12 с.
14. Мороз О. С. Фізична хімія поверхні напівпровідників. — К. : НТУУ КПІ, 1999. — 60 с.
15. Рыжиков Ю. И. Программирование на Фортране Power Station для инженеров. — СПб : КОРОНА принт, 1999. — 160 с.
16. Wolf H., Deubler S., Forkel D. Acceptors and donors in the wide gap semiconductors ZnO and SnO₂ / Defekts in Semiconductors — Edd. By H. J. von Bardelleben. Materials Scince Forum Volumes 10–12 (1986). — P. 863–868.

Глава VII

1. Бейтмен Г., Эрдейн А. Таблицы интегральных преобразований : т. I. — М. : Наука, 1969. — 343 с.
2. Градштейн И. С., Рыжик И. М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. — М. : Наука, 1971.
3. Грановский В. А. Динамические измерения: основы метрологического обеспечения. — Л. : Энергоатомиздат, 1984. — 224 с.
4. Гухман А. А. Введение в теорию подобия. — М. : Высшая школа, 1973. — 296 с.
5. Двайт Г. Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы. — М. : Наука, 1969. — 228 с.
6. Деч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования. — М. : Наука, 1971. — 288 с.
7. Заде Л., Дезоер И. Теория линейных систем. — М. : Наука, 1970. — 704 с.
8. Земнюк В. Н., Тартаковский Д. Ф. Динамические характеристики пленочных измерительных преобразователей. Измерительная техника. — 1973. — № 6. — С. 18–20.
9. Карслоу Х. С., Егер Д. К. Операционные методы в прикладной математике. — М. : Иностранная литература, 1948. — 292 с.
10. Мороз А. С., Кармадонов Н. И. Приведение математического описания массопереноса в системе тонкая пленка-подложка к виду моделей с сосредоточенными параметрами. — ВИМИ, 1989. — Вып. 1, деп. рук. № ДО7937. — 23 с.
11. Мороз О. С. Постійні часу релаксації інформативного параметру вихідного сигналу при масопереносі в бінарній системі плоских пластин. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук2001. — 12 с.
12. Таланчук П. М., Мороз А. С., Бульда В. А. Динамические характ. — К.: УкрНИИНТИ, 08.09.1986, деп. рук. № 2054-Ук86. — 12 с.
13. Шашков А. Г. Системно-структурный анализ процесса теплообмена и его применение. — М. : Энергоатомиздат, 1983. — 280 с.

Глава VIII

1. Воронов А. А., Титов В. К., Новогранов Б. Н. основы теории автоматического регулирования и управления. — М. : Высшая школа, 1977. — 519 с.

2. Мороз О. С. Системно-структурный анализ динамики перезарядки простых поверхностных электронных станів в умовах наявності поперечного електричного поля. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 6 с.

3. Мороз О. С. Системно-структурный анализ динамики хемосорбції простых идеальных газів на атомарно чистой поверхности напівпровідника. — К. : ДНТБУ, 11.05.99, деп. рук. № 131-Ук99. — 19 с.

4. Солодовников В. В., Плотников В. Н., Яковлев А. В. Основы теории и элементы систем автоматического регулирования : учеб. пособ. для вузов. — М. : Машиностроение, 1985. — 536 с.

5. Таланчук П. М., Мороз А. С., Бульда В. А. Динамические характеристики пленочных полупроводниковых газоанализаторов. — К. : УкрНИИНТИ, 08.09.1986, деп. рук. № 2054-Ук86. — 12 с.

6. Устройство для измерения парциального давления газа / В. П. Берчун, Г. М. Гаврилов, А. В. Гончаров, А. С. Мороз, В. С. Набатчиков, М. М. Нероденко, Е. П. Полищук, И. И. Статкевич, П. М. Таланчук. — Заявка № 3927044 от 18.IX.1985.

Глава IX

1. Ажогин В. В., Згуровский М. З. Машинное проектирование оптимальных систем управления пространственно распределёнными динамическими системами. — К. : Вища школа, 1985. — 170 с.

2. Изерман Р. Цифровые системы управления. — М. : Мир, 1984. — 542 с.

3. Мороз О. С. Анализ та синтез напівпровідникових сенсорів газу в рамках концепцій Хауффе. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 131-Ук2001. — 17 с.

4. Сэйдж З. П., Уайт Ч. С. Оптимальное управление системами. — М. : Радио и связь, 1982. — 392 с.

5. Топчиев Ю. И. Атлас для проектирования систем автоматического регулирования : учеб. пособ. для вузов. — М. : Машиностроение, 1989. — 752 с.

6. Устройство для измерения парциального давления газа / П. М. Таланчук, А. С. Мороз и др. — АС № 1356683 от 01.08.87. Заявка № 8965185 от 18.10.85.

7. Хауффе К. Реакции в твердых телах и на их поверхности. — М. : Иностранная литература, 1963.

Глава X

1. Акоф Р., Сасиени М. Основы исследования операций. — М. : Мир, 1971. — 534 с.
2. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров : определения, теоремы, формулы / под общ. ред. И. Г. Аромяновича. — М. : Наука, 1984. — 831 с.
3. Реклейтис Г., Рейвидран А., Регсдел К. Оптимизация в технике : в 2-х кн. / пер. с англ. — М. : Мир, 1986.
4. Таха Х. Введение в исследование операций : в 2-х кн. — М. : Мир. — 1985.
5. Мороз О. С. Аналіз впливу характеристичних розмірів елементів структури чутливого елемента на метрологічні характеристики напівпровідникових сенсорів. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук2001. — 12 с.
6. Мороз О. С. Оптимізація параметрів металоокисного чутливого елемента напівпровідникових сенсорів газу та температури по критерію максимуму селективності. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 9 с.
7. Мороз О. С. Оптимізація параметрів металоокисного чутливого елемента напівпровідникових сенсорів газу та температури по критерію максимуму чутливості. — К. : ДНТБУ, деп. рук. № 129-Ук01. — 8 с.
8. Таланчук П. М., Сергеев В. В., Фомин М. Н. Многокритериальная задача проектирования тонкопленочных измерительных преобразователей // Вестн. Киев. Политехн. Ин-та. Приборостроение. — К., 1986. — Вып. 16. — С. 40–42.

Навчальне видання

ТАЛАНЧУК Петро Михайлович
МОРОЗ Олександр Сергійович

**ТЕОРІЯ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ
СЕНСОРІВ ГАЗУ:
фундаментальні основи, аналіз, синтез**

Навчальний посібник

Головний редактор	Н. І. Перинська
Технічний редактор	І. Є. Гнатюк
Художник-дизайнер	І. О. Клименко
Комп'ютерна верстка	С. С. Думанецька
Коректор-редактор	С. І. Дудіна

Автор несе відповідальність за подання матеріалів,
які вміщено в посібнику П. М. Таланчука, О. С. Мороза «Теорія
напівпровідникових сенсорів газу: фундаментальні основи, аналіз, синтез».
Університет «Україна» користується майновими правами
на посібник П. М. Таланчука, О. С. Мороза «Теорія напівпровідникових
сенсорів газу: фундаментальні основи, аналіз, синтез».

*Оригінал-макет виготовлено у видавничо-друкарському комплексі
Університету «Україна»
03115, м. Київ, вул. Львівська, 23, тел. (044) 424-40-69
Свідоцтво про державну реєстрацію ДК № 405 від 06.04.01*

*Віддруковано з оригінал-макета у видавничо-друкарському комплексі
Університету «Україна»*

Підписано до друку 09.10.2008. Формат 60×84/16.

Папір офсетний. Умовн. друк. арк. 14,88.

Обл. вид. арк. 14,67. Наклад 200 прим.