

## 5. ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ГАЛУЗІ

УДК 537.[226+311]/0.1

Доц. М.М. Баран, канд. фіз.-мат. наук;

доц. І.М. Васькович, канд. екон. наук – НН Інститут підприємства та перспективних технологій НУ "Львівська політехніка"

### ЗАЛЕЖНІСТЬ ЕНЕРГІЇ ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ, ЛОКАЛІЗОВАНИХ НА КРАЙОВІЙ ДИСЛОКАЦІЇ, ВІД КОНЦЕНТРАЦІЇ ДОНОРІВ

Досліджено енергетичний спектр електронних станів, локалізованих на крайовій дислокації в моделі, яка враховує як електростатичну, так і деформаційну взаємодію між зарядженою крайовою дислокацією і вільними електронами. Показано, що збільшення концентрації донорів  $n_d$  призводить до пониження локальних електронних рівнів, а енергетична відстань при цьому між відповідними електронними рівнями зростає.

**Ключові слова:** електрон-деформаційний потенціал, концентрація електронів провідності, зони провідності, крайова дислокація, донори.

Проведений огляд літературних джерел [1-3] показує, що заряджені дислокації описують в межах електростатичної моделі [3], у якій крайову дислокацію розглядають у вигляді прямолінійної зарядженої нитки з лінійною густиною зарядів  $|\tau|$ , а незаряджені дислокації описують двома основними моделями дислокаційних електронних станів:

- а) модель "обірваних" зв'язків [4], яка враховує короткодіючий потенціал зарядженого ядра дислокації;
- б) модель деформаційного потенціалу [5], у якій локалізація електронів здійснюється далекодіючим механіко-деформаційним [6] і електрон-деформаційним полями [7]. У згаданих літературних джерелах [5-7] енергетичний спектр електронних станів, локалізованих на крайовій дислокації, знаходився або в полі електростатичного потенціалу [2], або в полі механіко-деформаційного потенціалу [6].

Отже, на цей час, актуальним стає дослідження енергетичного спектра електронних станів локалізованих на крайовій дислокації в моделі, яка враховує як електростатичну, так і деформаційну взаємодію між зарядженою крайовою дислокацією і вільними електронами.

Розглянемо напівпровідник  $n$ -типу (CdTe: Cl; ZnSe: Al, Ga) з густиною донорів  $n_d$ . Густина дислокацій  $N_d$  така, що рідівські циліндри [1] радіусом  $R$  не перекриваються ( $\pi R^2 < 1/N_d$ ). У разі виконання останньої умови у першому наближенні електронні стани формуються практично відокремленими крайовими дислокаціями. Заряджена дислокацію розглядають, як рівномірно заряджену лінію з лінійною густиною  $|\tau| = e\pi R^2 n_d$ . Між зарядженою дислокацією і вільними носіями беруть до уваги як електростатичну взаємодію [1]

$$V_c(\vec{r}) = \frac{e^2 f}{\epsilon \epsilon_0 a} \left[ 2 \ln \left( \frac{R}{r} \right) - \left( 1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \right]; \quad (1)$$

де:  $R$  – радіус циліндричної області позитивного просторового заряду, що визначається з умови рівності позитивного заряду циліндра і від'ємного заряду дислокації, тобто  $R = \left( \frac{f}{\pi a n_d} \right)^{1/2}$  [8];  $f = \frac{a}{c}$  – коефіцієнт заповнення дислокації;  $a$  – період ґратки вздовж осі дислокації;  $c$  – середня відстань між електронами на дислокації. Зазвичай,  $f \leq 0,1$  [8];  $n_d$  – концентрація донорів у напівпровіднику  $n$ -типу;

так і сумарну деформаційну, яка включає як механіко-деформаційний потенціал [6]

$$V_{mech}(\rho, \theta) = SU_{mech}(\rho, \theta) = -\frac{1-2\nu}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{Sb}{\rho} \cdot \cos \theta, \quad (2)$$

де  $\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}$  – коефіцієнт Пуассона,  $C_{ij}$  – пружні сталі ( $i, j=1,2$ );  $\rho, \theta$  – полярні координати;  $\rho_0$  – радіус ядра дислокації ( $\rho_0 = (1+2)a$ ,  $a$  – постійна ґратки); кут  $\theta$  відраховується від додатково вставленої дислокаційної площини до радіуса-вектора  $\vec{\rho} = (x, y)$  у кристалічній площині  $XOY$ ,  $\vec{b} = (b, 0, 0)$  – вектор Бюргерса (рис. 1); так і електрон-деформаційний [7]

$$V_{el-d} = \frac{DS}{\rho} \cdot \left[ \frac{S^2 R_s}{K \rho_1} \cdot (2\rho I_1(g\rho_1) K_1(g\rho) - 1) \right], \quad (3)$$

де:  $K$  – пружна стала;  $\rho_1 = (2-3)b$  – радіус ядра дислокації;  $I_1(g\rho_1), K_1(g\rho)$  – функції Бесселя і Макдональда першого роду порядку одиниці.

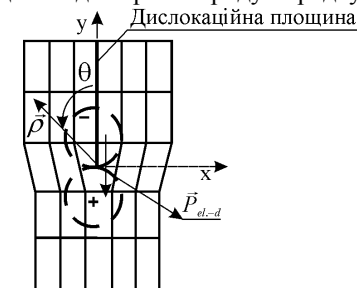


Рис. 1. Модель кристала з крайовою дислокацією. Вісімка, яку позначено штриховою лінією, зображає електрон-деформаційний диполь, котрий існує вздовж осі дислокації (OZ)

Рух носіїв розглядають у наближенні ефективної маси, а вплив деформації ґратки – у наближенні деформаційного потенціалу. Розрахунок енергетичного спектра електронних станів, локалізованих на крайовій дислокації, проводять в однозонному наближенні на основі рівняння Шредінґера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{\hbar^2 R}{2m^* \rho^2} \left( m^2 - \frac{1}{4} \right) + V_{int} R = ER; \quad (4)$$

$$\text{де } V_{int} = \frac{e^2 \pi n_d R_1^2}{\epsilon \epsilon_0} \cdot \left[ 2 \ln \frac{R_1}{\rho} - \left( 1 - \frac{\rho^2}{R_1^2} \right) \right] + \frac{DS}{\rho} \cdot \left[ \frac{S^2 R_s}{K \rho_1} \cdot (2\rho I_1(g\rho_1) K_1(g\rho) - 1) - 1 \right]. \quad (5)$$

У рівнянні (4) сума двох доданків (другого і третього) описує ефективну потенціальну енергію електрона в полі зарядженої дислокації

$$V_{ef.} = V_{int} + \frac{\hbar^2}{2m^*\rho^2} \left( m^2 - \frac{1}{4} \right). \quad (6)$$

Розкладемо потенціальну енергію  $V_{ef.}$  в ряд поблизу точки  $\rho_0$ , яку можна знайти з умови  $V'_{ef.} = 0$

$$V_{ef.}(\rho) = V_{ef.}(\rho_0) + \frac{V''_{ef.}(\rho_0)}{2} \cdot (\rho - \rho_0)^2 + \dots, \quad (7)$$

в якій  $V_{ef.}$  має мінімум. За  $|\rho - \rho_0| \ll \rho_0$  у ряді можна обмежитися лише двома доданками, де

$$V''_{ef.}(\rho_0) = -\frac{3\hbar^2 \left( m^2 - \frac{1}{4} \right)}{m^* \rho_0^4} + \frac{2e^2 \pi n_d}{\varepsilon \varepsilon_0} \cdot \frac{\rho_0^2 + R^2}{\rho_0^2} + \frac{2DS}{\rho_0^3} \cdot \left[ \frac{S^2 R_s}{K \rho_1} \cdot \left( \frac{I_1(g \rho_1) \sqrt{\pi}}{g} - \rho_1 \right) - 1 \right] \quad (8)$$

Якщо радіальні функції  $R(\rho)$  істотно відмінні від нуля лише в області таких значень змінної  $\rho$  ( $|\rho - \rho_0| \ll \rho_0$ ), то для наближеного розрахунку  $R(\rho)$  і рівнів енергії  $E_{n,|m|}$  ми приходимо до задачі про гармонічний осцилятор з точкою рівноваги  $\rho = \rho_0$ . При цьому

$$R(\rho) = \frac{1}{\sqrt{2^{n_\rho} (n_\rho)! \tilde{\rho}_0 \sqrt{\pi}}} \cdot \exp \left[ -\frac{(\rho - \rho_0)^2}{2(\tilde{\rho}_0)^2} \right] \cdot H_{n_\rho} \left( \frac{\rho - \rho_0}{\tilde{\rho}_0} \right), \quad (9)$$

де  $n_\rho$  – радіальне квантове число,

$$\tilde{\rho}_0 = \left[ \frac{\hbar^2}{V''_{ef.}(\rho_0) m^*} \right]^{1/4}; \quad (10)$$

$$E_{n,|m|} = V_{ef.}(\rho_0) + \sqrt{\frac{V''_{ef.}(\rho_0) \hbar^2}{4m^*}} \cdot (n - |m|). \quad (11)$$

Для справедливості отриманих результатів (9), (11) необхідно, щоб виконувалася умова:  $R(\rho)$  була істотно відмінна від нуля лише за  $|\rho - \rho_0| \ll \rho_0$ . Враховуючи, що  $R(\rho)$  істотно відмінна від нуля при

$$\frac{k}{2} (\rho - \rho_0)^2 \leq \hbar \omega (n - |m|), \quad (12)$$

де:  $\sim 77 meV$ ,  $\omega = V''_{ef.}$ , то умова  $|\rho - \rho_0| \ll \rho_0$  набуде вигляду:

$$n \ll \frac{3}{4} \left( m^2 - \frac{1}{4} \right) + \frac{e^2 \pi n_d (\rho_0^2 + R^2) \rho_0^2 m^*}{2 \hbar^2 \varepsilon \varepsilon_0} + \frac{DS \rho_0 m^*}{2 \hbar^2 \varepsilon \varepsilon_0} \left( \frac{S^2 R_s}{K \rho_1} \left( \frac{I_1(g \rho_1) \sqrt{\pi}}{g} - 1 \right) - 1 \right)^{1/2} + |m|, \quad (13)$$

чим і визначається область застосування отриманого наближеного розв'язку.

На рис. 2 наведено концентраційну залежність енергії електронних станів  $E_{n,|m|}$ , локалізованих на крайовій дислокації у монокристалі CdTe: Cl.

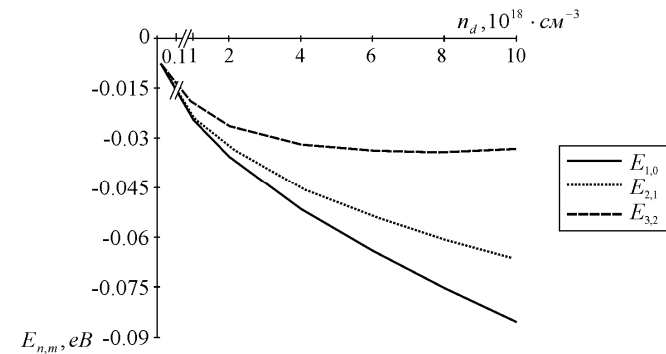


Рис. 2. Залежність енергії локалізованих рівнів від концентрації донорів

Обчислення цих залежностей проводили за значень параметрів:

$$m^* = 0.11 m_0, K = 0.198 \frac{eB}{0^3}, S = 4.5 leB, f = 0.1. \quad A$$

Як видно з рис. 2, залежність енергії електронних станів  $E_{n,|m|}$  від концентрації донорів  $n_d$  ( $n_d = (10^{16} \div 10^{18}) cm^{-3}$ ) має монотонно спадний характер. Зокрема, збільшення концентрації донорів  $n_d$  на два порядки призводить до пониження локальних електронних рівнів відповідно на  $\sim 77 meV$ ,  $\sim 59 meV$ ,  $\sim 26 meV$ . Таку поведінку електронних рівнів можна пояснити тим, що з ростом  $n_d$  глибина електростатичної деформаційної потенціальної ями  $V_{ef.}$  (формула 7) зростає. Окрім цього, з ростом ступеня легування енергетична відстань між відповідними електронними рівнями зростає. Наприклад, за концентрації  $4 \cdot 10^{17} cm^{-3}$  відстань між електронними рівнями  $E_{1,0}$  і  $E_{2,1}$  становить  $\sim 6,8 meV$ , а за  $10^{18} cm^{-3}$  –  $\sim 19 meV$ .

### Література

1. Шикин В.Б. Заряженные дислокации в полупроводниковых кристаллах / В.Б. Шикин, Ю.В. Шикина // Успехи физических наук : научн. журнал. – 1995. – Т. 165, № 8. – С. 887-917.
2. Бонч-Бруевич В.Л. К теории электронных состояний, связанных с дислокациями / В.Л. Бонч-Бруевич, В.Б. Гласко // Физика твердого тела : науч. журнал. – 1961. – Т. 3, вып. 1. – С. 36-52.
3. Стасюк І.В. Деформаційні і електронні стани напівпровідника поблизу межі поділу областей з різними механічними напруженостями / І.В. Стасюк, Р.М. Пелешак // Український фізичний журнал : наук. журнал. – 1994. – Т. 39, № 7. – С. 856-861.
4. Осипьян Ю.А. Спектр дислокационных состояний в полупроводниках / Ю.А. Осипьян, И.А. Рьжжик // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1980. – Т. 79, № 3(9). – С. 961-973.
5. Emtage P.R. Binding of Electrons, Holes, and Excitons to Dislocations in Insulators / P.R. Emtage // Phys. Rev. – 1967. – Vol. 163, № 3. – P. 865-872.
6. Paidar V. Local density of electronic states at the core of the screw dislocations in BCC lattice / V. Paidar // Phys. Stat. Sol. – 1981. – Vol. 103, № 2. – P. K93-K97.
7. Landauer R. Bound States in Dislocations / R. Landauer // Phys. Rev. – 1954. – Vol. 94, № 5. – P. 1386-1388.
8. Шикин В.Б. О заряженных дислокациях в полупроводниках / В.Б. Шикин, И.И. Шикин // Физика твердого тела : науч. журнал. – 1988. – Т. 30, вып. 5. – С. 1297-1304.

**Баран М.М., Васкович И.М. Зависимость энергии электронных состояний, локализованных на краевой дислокации, от концентрации доноров**

Исследован энергетический спектр электронных состояний, локализованных на краевой дислокации в модели, которая учитывает как электростатическое, так и деформационное взаимодействия между заряженной краевой дислокацией и свободными электронами. Показано, что увеличение концентрации доноров  $n_d$  приводит к понижению локальных электронных уровней, а энергетическое расстояние при этом между соответственными электронными уровнями увеличивается.

**Ключевые слова:** электрон-деформационный потенциал, концентрация электронов проводимости, зоны проводимости, краевая дислокация, доноры.

**Baran M.M., Vaskovich I.M. Energy Dependence of electron positions located on the edged dislocation from the concentration of donors**

Energy spectrum of electron positions located on the edged dislocation in the model which takes into consideration both electrostatic and deformational interactions between charged edged dislocation and free electrons has been researched. It is shown that the increase of concentration of donor  $n_d$  results in lowering of local electronic levels, and power distance here between corresponding electronic levels grows.

**Keywords:** electron-deformational potential, concentration of conduction electrons, conduction area, dislocation, donors.

УДК 517.95+534.1

Доц. П.Я. Пукач, канд. фіз.-мат. наук –  
НУ "Львівська політехніка"

**ЯКІСНІ МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ КОРЕКТНОСТІ РОЗВ'ЯЗКУ В МАТЕМАТИЧНІЙ МОДЕЛІ НЕЛІНІЙНИХ КОЛИВАНЬ НАПІВНЕОБМЕЖЕНИХ ПРУЖНИХ ТІЛ**

Викладено методику якісного дослідження розв'язку математичної моделі коливань напівнеобмежених пружних тіл. Розглянута система узагальнює систему нелінійних хвильових рівнянь, яка вивчається в теорії пружності. Отримано класи коректності узагальненого розв'язку – вагові соболевські простори функцій з якісною поведінкою на нескінченності.

**Ключові слова:** нелінійні коливання, нелінійна крайова задача, метод Гальоркіна, метод монотонності, необмежена область.

**Актуальність проблеми та огляд основних результатів.** Активізація теоретичних досліджень вивчення динамічних явищ у нелінійних коливальних конструкціях за дії різного роду збурень (силових, інерційних, кінематичних) зумовлена як логікою розвитку динаміки коливальних систем, так й інтересами різноманітних практичних застосувань. Цю проблему достатньо досліджено у випадку коливальних систем, що моделюються лінійними диференціальними рівняннями (див. для прикладу [1]). Зазвичай, такі розрахунки не приводять до цілком адекватного відображення динамічних явищ, оскільки процеси в реальних системах не може бути описано в термінах виключно лінійної теорії. Усе це призводить до зниження цінності отриманих результатів дослідження та до визнання необхідності проведення розрахунків на основі нелінійної теорії.

Асимптотичні методи нелінійної механіки дали змогу дослідити широкий клас механічних коливальних систем для випадку малої залежності ам-

плітуди коливань від нелінійних пружних сил та сил опору [2, 3]. У випадку нелінійного закону пружності матеріалу, істотно нелінійної залежності амплітуди коливань від пружних сил та сил опору задача пов'язана з принциповими математичними труднощами, оскільки відсутні загальні аналітичні методи розв'язування такого класу задач. Якісні методи загальної теорії нелінійних крайових задач дають змогу для широкого класу нелінійних коливальних систем отримати результати коректності розв'язку. Вказана методика дає змогу обґрунтувати коректність розв'язку моделі та надалі для її дослідження застосовувати різноманітні наближені методи. Отож, проблеми якісних методів дослідження нелінійних коливальних систем є актуальними.

У роботі математичну модель нелінійних коливань напівнеобмеженого каната під дією нелінійних сил опору. Подібні задачі виникають в різноманітних технічних застосуваннях – щодо коливань трубопроводів, залізничних колій, довгих мостів, електричних ліній, оптичних волокон тощо [4-6]. Розглянуто математичну модель нелінійних коливань, яку описано системою рівнянь другого порядку

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left( A(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( B(x, t) \frac{\partial u}{\partial t} \right) + B_1(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} + C(x, t)u + G(x, t) \left| \frac{\partial u}{\partial t} \right|^{p-2} \frac{\partial u}{\partial t} = F(x, t), p > 2 \quad (1)$$

в необмеженій за просторовою змінною області. Система (1) моделює коливні процеси у конвеєрних лініях стрічкового (канатного) типу для випадку рухомої стрічки [3]. Рівняння та системи вигляду (1), які моделюють коливні процеси у середовищі з опором, вивчають у теорії пружності (див. для прикладу [7-9]). Задачі для нелінійних рівнянь та систем  $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \frac{\partial}{\partial x} \left( A(x) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + Q(u) = F(x, t)$  ( $Q$  – нелінійний оператор) у необмежених областях розглядали у працях [10-14]. Деякі результати коректності розв'язку у цих працях отримано в припущенні певної якісної поведінки розв'язку, початкових даних та правої частини рівняння (системи) на нескінченності, інші результати – без таких припущень. У цій статті класи коректності розв'язку мішаної задачі є ваговими соболевськими просторами функцій, що описують якісну поведінку розв'язку на нескінченності. Ця поведінка залежить від правої частини системи та початкових даних задачі. Отримані результати певним чином доповнюють [15].

**Постановка задачі. Формулювання результату.** В області  $Q_T = (0, +\infty) \times (0, T)$ ,  $0 < T < \infty$  розглядаємо для системи (1) мішану задачу з початковими умовами

$$u(x, 0) = \varphi_0(x), \quad (2)$$

$$\frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} = \varphi_1(x) \quad (3)$$

та крайовою умовою  $u(x, 0) = 0$ . (4)