

О СООТНОШЕНИИ КОМПОНЕНТ СВЯЗИ В ПРОВОДНИКАХ, ПОЛУПРОВОДНИКАХ И ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ.

*Трубачева А.М., Сироткин О.С.

Казанский Государственный энергетический университет

*e-mail: trub@iset.ru

В литературе приводится много разрозненных данных по свойствам некоторых бинарных соединений [1, 2, 3, 4, 5]. В «Химической энциклопедии» [4, 5] к проводникам приравнивают такие бинарные соединения, как карбиды элементы Fe, Co, Ni, и переходных металлов IV – VII групп, а также CoSb. Цель данной работы – показать, как влияет тип химического взаимодействия на электрическую проводимость соединений.

В таблице 1 приведены некоторые бинарные соединения, по которым в литературе имеются наиболее полные данные. Указанные соединения разбиты на классы по удельному электрическому сопротивлению и ширине запрещенной зоны. Также в таблице 1 приводятся значения степеней ковалентности, металличности и ионности данных гетероядерных соединений. К сожалению, авторам не удалось найти некоторые данные по свойствам бинарных гетероядерных проводников. По этой причине в таблице приведены данные по гомоядерному проводниковому материалу (алюминий).

Таблица 1. Значения степеней ковалентности, металличности и ионности некоторых гетероядерных соединений, а также их физико-химические свойства.

Связь	характеристика	C _к	C _м	C _и	Плотность ρ кг/м ³ [1]	Температура плавления °С [1]	Диэлектрическая проницаемость, ε [1]	Ширина запрещенной зоны при 20 °С, эВ [1, 2]	Подвижность м ² /(В*с) [1, 2]		Общая характеристика различных материалов [1]	
									электронов	дырок	Удельное электрическое сопротивление, ρ	Ширина запрещенной зоны
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Al	Проводник	44,52	55,48	0,00	2698,90	660,24			0		$10^{-8} - 10^{-5}$ ($\rho_{Al} = 0,028 \cdot 10^{-6}$)	0
AlP	полупроводник	48,62	47,51	3,87	2420,00	2550,00	9,80	2,450	0,008	0,003	$10^{-6} - 10^{+8}$	0,05 – 3
GaP		48,40	47,56	4,04	4130,00	1467,00	10,00	2,200	0,019	0,012		
InP		47,92	47,66	4,42	4790,00	1070,00	12,10	1,350	0,460	0,015		
AlAs		48,14	49,29	2,58	3600,00	1750,00	10,90	2,160	0,028	-		
GaAs		47,93	49,35	2,72	5320,00	1238,00	13,80	1,430	0,950	0,045		
InAs		47,48	49,48	3,04	5690,00	943,00	14,55	0,356	3,300	0,046		
AlSb		46,90	52,25	0,85	4220,00	1060,00	11,21	1,620	0,020	0,055		
GaSb		46,72	52,35	0,94	5620,00	712,00	15,69	0,700	0,400	0,140		
InSb		46,32	52,54	1,14	5780,00	525,00	17,72	0,180	7,800	0,075		
SiO	диэлектрик	51,734	22,340	25,926							$10^7 - 10^{17}$	Больше 3

Анализ таблицы 1 показывает, что в ряду фосфидов Al, Ga, In уменьшаются значения S_K , увеличиваются значения S_M и S_I и соответственно уменьшаются температуры плавления, ширина запрещенной зоны, а также увеличиваются значения диэлектрической проницаемости и подвижности дырок и электронов. Последнее логично увязывается с увеличением степени металличности и уменьшением ковалентности. Практически аналогичные изменения происходят и в других классах соединений. Так, например, в ряду арсенидов Al, Ga, In уменьшаются значения S_K , увеличиваются значения S_M и S_I , уменьшаются температуры плавления, ширины запрещенной зоны, а также увеличиваются значения плотности, диэлектрической проницаемости и подвижности дырок и электронов, последнее связано с увеличением степени металличности. В ряду антимонидов Al, Ga, In уменьшаются значения S_K , увеличиваются значения S_M и S_I , уменьшаются температуры плавления, ширины запрещенной зоны, а также происходит увеличение плотности, диэлектрической проницаемости и подвижности электронов, что связано с увеличением S_M , а подвижность дырок увеличивается от AlSb до элементе GaSb, а затем падает.

Данные приведенные в столбцах (12) и (13) таблицы 1 и литературные данные [4, 5] подтверждаются нашими расчетами. Действительно, различие между классами проводниковых, полупроводниковых и диэлектрических соединений определяется соотношением трех компонент химической связи. В первом классе соединений, представителем которого в таблице 1 является алюминий, S_K меньше 47% (граничные значения для полупроводников), а S_M – более 54% (граничные значения для полупроводников). В полупроводниках S_K и S_M соизмеримы между собой и значительно превалируют над S_I , S_K изменяется от 51,72 до 45,07, S_M – от 53,54 до 39,85 и S_I – от 12,69 до 0,85. Что касается диэлектриков, представителем класса которых мы выбрали кремнезем, его степень ковалентности составляет 51,74%, S_M – 22,34 и S_I – 25,93%. Это говорит о том, что чем больше S_M у соединения, тем более он способен проявлять проводящие свойства и наоборот, у диэлектриков эта характеристика составляет наименьшее значение – 22,34%, а ковалентность – наибольшее. Этим и объясняется их полная неспособность проводить электрический ток.

Список литературы

1. Колесов С.Н., Колесов И.С. Материаловедение и технология конструкционных материалов. М.: Высшая школа, 2004.
2. Физическая химия силикатов учеб. для ВУЗов под ред. чл.-корр. АН УССР А.А. Пащенко. М.: В.Шк. 1986.
3. Скаков Ю.А. Интерметаллиды. Химическая энциклопедия, т 2, М., БРЭ, 1998 с.478 – 486
4. Кислый П.С. Карбиды. Химическая энциклопедия, т 2, М., БРЭ, 1998 с.623 – 625
5. Федоров П.И. Кобальт. Химическая энциклопедия, т 2, М., БРЭ, 1998 с.819 – 822