

7. Devijver P.A. On the edited nearest neighbor rule / P.A. Devijver and J. Kittler // in Proc. 5th Int. Conf. Pattern Recognit., Miami, FL, 1980. – PP. 72-80.

8. Brighton H. Advances in instance selection for instance-based learning algorithms / H. Brighton and C. Mellish // Data Mining Knowl. Disc, 2002. – Vol. 6. – PP. 153-172.

Дуригина З.А., Ткаченко Р.О., Ткаченко О.Р., Щербовских Н.В. Оценка физико-механических характеристик поверхности программными способами искусственного интеллекта

Проведена оценка отсутствующих характеристик микротвердости и термо-э.д.с. поверхности стали после лазерного легирования ниобием и азотом методом заполнения пропусков с использованием нейросетевых средств. Рассчитаны погрешности заполнения пропусков предусмотренных данных для известных тестовых значений.

Ключевые слова: лазерное легирование, микротвердость, термо-э.д.с., искусственный интеллект.

Duriagina Z.A., Tkachenko R.O., Tkachenko O.R., Shcherbovskykh N.V. The physico-mechanical properties measurement of surface with using of artificial intellect software

Was prognostication for lack the information of the surface microhardness and local t. – e.m.p. after laser alloying of Nb and N with methods of infill gaps, that base on the MNT in the program complex Expleo. Was lead the comparative valuation exactness of the prognostication.

Keywords: artificial intellect, laser alloying, microhardness, local t. – e.m.p.

УДК 537.226+537.311/0.1

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

доц. І.М. Васькович, канд. екон. наук – НУ "Львівська політехніка"

ЕНЕРГІЯ ДНА ЗОНИ ПРОВІДНОСТІ У КРИСТАЛІ З КРАЙОВОЮ ДИСЛОКАЦІЄЮ ЗІ САМОУЗГОДЖЕНИМ ВРАХУВАННЯМ ЕЛЕКТРОН-ДЕФОРМАЦІЙНОЇ ВЗАЄМОДІЇ

Досліджено вплив самоузгодженого електрон-деформаційного потенціалу за різних значень концентрації електронів провідності на значення країв дозволених зон (краю зони провідності $E_c(\rho, \theta)$) в околі крайової дислокації.

Ключові слова: електрон-деформаційний потенціал, концентрація електронів провідності, зона провідності, крайова дислокація.

Як показує огляд літератури з цієї проблеми [1-4], зонну схему напівпровідника *n*-типу (або *p*-типу) в околі дислокації розглянуто або в наближенні механіко-деформаційного потенціалу [1], або в наближенні електростатичного потенціалу поля екранованого заряду носіїв електричного струму, захоплених обірваними зв'язками на ядрі дислокації [5].

Щоб знайти аналітичний вигляд для енергетичного положення дна зони провідності $E_c(\rho, \theta)$, скористаємося результатом розв'язку самоузгодженої системи рівнянь, яку розглянемо для електрон-деформаційної моделі кристала з крайовою дислокацією [6-11]. Отже, під час розв'язування самоузгодженої системи було отримано вираз для положення дна зони провідності

$$E_c(\rho, \theta) = \lambda^0 + S\Delta U(\rho, \theta) - e\varphi(\rho, \theta) + V_c(\rho, \theta), \quad (1)$$

$$\Delta U(\rho, \theta) = -\frac{S}{K} \Delta n(\rho, \theta) + U_{mech}(\rho, \theta), \quad (2)$$

$$\Delta n(\rho, \theta) = R_S \left\{ -SD \cos \theta \cdot \left[\frac{2}{\rho_0} I_1(g\rho_0) K_1(g\rho) - \frac{1}{\rho} \right] - V_c \right\}, \rho \in [\rho_0, +\infty) \quad (3)$$

$$\varphi(\rho, \theta) = \frac{2DS}{\rho_0 e} \cos \theta \begin{cases} K_1(g\rho_0) \cdot I_1(g\rho), & \rho \in [0, \rho_0] \\ I_1(g\rho_0) \cdot K_1(g\rho), & \rho \in [\rho_0, +\infty) \end{cases} \quad (4)$$

$$V_c(\vec{\rho}) = \frac{e^2 f}{\varepsilon \varepsilon_0 a} \left[2 \ln \left(\frac{R}{\rho} \right) - \left(1 - \frac{\rho^2}{R^2} \right) \right], \quad (5)$$

де: $K_1(g\rho)$, $I_1(g\rho)$ – функція Макдональда і Бесселева функція першого роду першого порядку [12], $D = \frac{1-2\nu}{2\pi(1-\nu)} b$; g – величина, обернена до ефективного радіуса екранування, зумовленого електрон-деформаційною взаємодією, яка залежить від ступеня заповнення зони провідності $\bar{n}$, пружних сталей C_{ij} і ефективної маси $g^2 = \frac{e^2 R_S}{\varepsilon \varepsilon_0}$, S – константа деформаційного потенціалу зони провідності; $K = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}$ – пружна стала, n_0 – середня концентрація електронів провідності у напівпровіднику; $\alpha^* = \frac{\hbar^2}{2m^*}$,

$$R_S = \left(\frac{3}{8} \right)^{1/3} \cdot \frac{1}{\alpha^* \pi^{4/3} \Omega_0^{1/3}} \cdot \frac{n_0^{1/3} [1 + p n_0^{1/3}]^{1/2}}{1 - \frac{3}{2} p n_0^{1/3} \cdot [1 + p n_0^{1/3}]^{1/2}}, \quad p = \frac{S^2}{(3\pi^2)^{2/3} \cdot \alpha^* K},$$

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

$$U_{mech}(\rho, \theta) = -\frac{1-2\nu}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{b}{\rho} \cos \theta, \quad \rho \geq \rho_0 \quad (6)$$

де: $\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}}$ – коефіцієнт Пуассона, C_{ij} – пружні сталі ($i, j=1,2$); ρ, θ – полярні координати; ρ_0 – радіус ядра дислокації ($\rho_0 = (l \div 2)a$, a – постійна ґратки); кут θ відраховується від додатково вставленої дислокаційної площини до радіуса-вектора $\vec{\rho} = (x, y)$ у кристалічній площині XOY.

Щоб відшкодувати аналітичний вигляд для енергетичного положення дна зони провідності $E_c(\rho, \theta)$, необхідно у формулу (1) підставити вираз для

параметра сумарної деформації $\Delta U(\rho, \theta)$ з урахуванням енергії електростатичної взаємодії ($e\varphi(\rho, \theta)$), зумовленої перерозподілом електронної густини внаслідок деформації ґратки в околі дислокації та кулонівської енергії $V_c(\vec{\rho})$ електрона в околі зарядженої дислокації, оточеної іонізованими донорами густиною n_d . Для сильно легованих напівпровідників, для яких виконується умова $|S\Delta U| \sim |e\varphi - V_c|$, при $n_0 = (10^{17} \div 10^{19}) \text{ см}^{-3}$ енергія дна зони провідності в околі ядра крайової дислокації має вигляд:

$$E_c(\rho, \theta) = \lambda_0 + \left(1 + \frac{S^2 R_s}{K}\right) \cdot \left[V_c(\rho) + SD \cos \theta \cdot \left(\frac{2}{\rho_0} I_1(g\rho_0) K_1(g\rho) - \frac{1}{\rho} \right) \right], \rho \geq \rho_0 \quad (7)$$

Для незарядженої крайової дислокації $V_c = 0$.

Як видно з формули (1), край зони провідності в околі ядра крайової дислокації ($E_c(\rho, \theta)$) у сильно легованих напівпровідниках (наприклад, CdTe: Cl, ZnSe: Al, у яких концентрація електронів провідності n_0 може досягати порядку 10^{17} см^{-3} – $5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [13] або у напівпровідниках з рідкісноземельними елементами $\text{Sm}_{1-x}\text{Cd}_x\text{S}$ складу $0.15 < x \leq 0.22$, $n_0 \sim 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [14]) здебільшого формується як енергією $V_c(\vec{\rho})$, так і енергією електрон-деформаційної взаємодії $\left(V_{el.-def.}(\rho, \theta) = -\frac{S^2}{K} \Delta n(\rho, \theta) \right)$, оскільки енергія електростатичної взаємодії ($e\varphi(\rho, \theta)$) практично компенсується енергією зумовленою механічною деформацією (SU_{mech}).

У слаболегованих напівпровідниках (наприклад, CdTe: Cl, ZnSe: Al, в яких концентрація електронів провідності $n_0 < 10^{17} \text{ см}^{-3}$ або у напівпровідниках з рідкісноземельними елементами $\text{Sm}_{1-x}\text{Cd}_x\text{S}$ ($x \leq 0,15$)) виконується умова $|e\varphi - V_c| \ll |S\Delta U|$. Відповідно вираз для енергії дна зони провідності в околі ядра крайової зарядженої дислокації ($\rho \geq \rho_0$) набуде вигляду:

$$E_c(\rho, \theta) = \lambda_0 + \left[SD \cos \theta \cdot \left(\frac{S^2 R_s}{K} \left(\frac{2}{\rho_0} I_1(g\rho_0) K_1(g\rho) - \frac{1}{\rho} \right) - \frac{1}{\rho} \right) \right] + \frac{S^2 R_s}{K} \cdot V_c, \rho \geq \rho_0 \quad (8)$$

Для незарядженої дислокації $V_c = 0$.

На рис. 1, 2 наведено результати числових розрахунків координатної залежності енергії дна зони провідності в площині $\theta = 0$ $E_c(\rho, \theta = 0)$ ($\rho \geq \rho_0$) (заряджена дислокація – рис. 1, незаряджена дислокація – рис. 2) за концентрацій електронів провідності $n_0 = (10^{17} \div 10^{19}) \text{ см}^{-3}$ у кристалах CdTe: Cl, які досягаються різним ступенем легування Cl [13]. Обчислення цих залежностей виконано за значень параметрів, які характерні для CdTe: Cl: $m^* = 0.11m_0$, $K = 0.198 \frac{eB}{\text{\AA}^3}$, $S = 4.5eB$ [15].

A

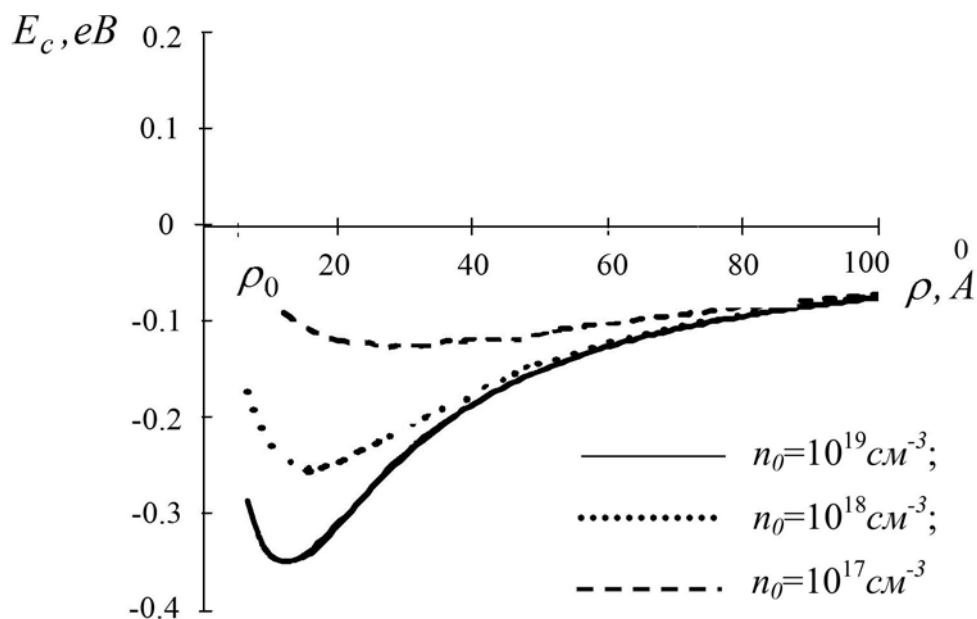


Рис. 1. Залежність енергії дна зони провідності від відстані ρ від ядра дислокації в площині $\theta = 0$ (заряджена дислокація)

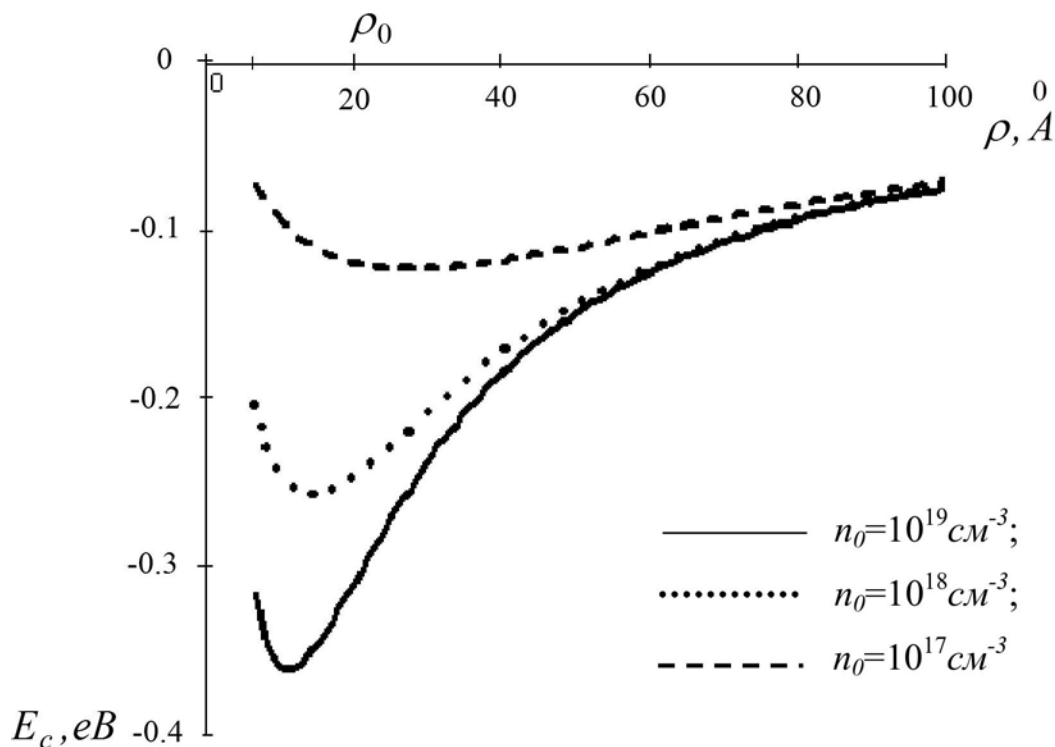


Рис. 2. Залежність енергії дна зони провідності від відстані ρ від ядра дислокації в площині $\theta = 0$ (незаряджена дислокація)

Як видно, самоузгоджене врахування ефекту електростатичної взаємодії зарядів, зумовленого перерозподілом електронної густини внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку (сильнолеговані напівпровідники) призводить до того, що поблизу ядра крайової дислокації ($\rho \geq \rho_0$) дно зони провідності неоднорідно опускається відносно дна зони провідності недеформованого кристала (далеко від дислокації). Координатна залежність енергії дна зони провідності має немонотонний характер з мінімумом поблизу ядра дислокації. З ростом концентрації електронів провідності мінімум енергії дна зони

провідності зсувається в сторону менших енергій, а його координатне положення ($\rho = \rho_c$) – в бік ядра дислокації. Зокрема, в разі зростання концентрації електронів провідності на два порядки ($n_0 = (10^{17} \div 10^{19}) \text{ см}^{-3}$) мінімум енергії дна зони провідності поблизу ядра зарядженої крайової дислокації зсувається в сторону менших енергій на 227 meV , а для незарядженої – на 240 meV .

Така зміна енергії дна зони провідності зумовлена дією двох конкурентних чинників: електростатичною взаємодією та деформацією ґратки, зумовленою як механічною дією дислокації, так і локальним просторовим перерозподілом електронів провідності внаслідок самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії. На відстані ρ_c від ядра крайової дислокації деформаційна складова енергії дна зони провідності за величиною дорівнює електростатичній, але протилежна за знаком.

Таким чином, електростатична взаємодія зарядів, зумовленої перерозподілом електронної густини в околі дислокації, внаслідок самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку призводить до немонотонної зміни енергії дна зони провідності поблизу ядра крайової дислокації, тоді як неврахування цієї взаємодії – до монотонної [16, 17]. Такий характер поведінки енергії дна зони провідності в околі ядра ($\rho \geq \rho_0$) крайової дислокації повинен проявитися наявністю локалізованих електронних рівнів.

Література

1. Разумова М.А. Спектр электронных состояний, локализованных на краевой дислокации, в модели деформационного потенциала / М.А. Разумова, В.Н. Хотяинцев // ФТТ. – 1989. – Т. 31, вып. 2. – С. 275-277.
2. Шикин В.Б. О заряженных дислокациях в полупроводниках / В.Б. Шикин, И.И. Шикин // ФТТ. – 1988. – Т. 30, вып. 5. – С. 1297-1304.
3. Пекар С.И. Теория подвижности, эффекта Холла и магнитосопротивления в электронных полупроводниках с заряженными дефектами / С.И. Пекар // ФТТ. – 1966. – Т. 9, № 4. – С. 1115-1121.
4. Дубровский И.М. Теория электронных явлений в деформированных кристаллах / И.М. Дубровский. – К. : РИО ИМФ, 1999. – 259 с.
5. Канер Э.А. Дислокационные зоны электронного энергетического спектра / Э.А. Канер, Э.П. Фельдман // ЖЭТФ. – 1971. – Т. 69, вып. 1(7). – С. 419-432.
6. Пелешак Р.М. Мікроскопічна теорія електронного стану кристалів з дислокаціями / Р.М. Пелешак // УФЖ. – 2000. – Т. 45, № 6. – С. 738-743.
7. Пелешак Р.М. Электронное перераспределение в окрестности ядра линейной дислокации / Р.М. Пелешак, Б.А. Лукиянец // Письма в ЖТФ. – 1998. – Т. 24, № 2. – С. 37-41.
8. Пелешак Р.М. Электронные состояния деформации решетки кристалла при наличии точечных дефектов / Р.М. Пелешак // Препринт-69-53 ИТФ ФН УССР. – К., 1989. – 24 с.
9. Пелешак Р.М. Спектр электрона в электрон-деформаційній потенціальній ямі, створеній крайовою дислокацією / Р.М. Пелешак, М.М. Баран // УФЖ. – 2000. – Т. 45, № 2. – С. 251-254.
10. Peleschak R.M. Effect of the conduction zone filling degree on the energy position of localized electron state at dislocation wall / R.M. Peleschak, M.M. Baran // Functional Materials. – 2002. – Vol. 9, № 3. – P. 474-480.
11. Пелешак Р.М. Вплив самоузгодженої електрон-деформаційної взаємодії на електронні стани, локалізовані на крайовій дислокації / Р.М. Пелешак, М.М. Баран // УФЖ. – 2005. – Т. 50, № 3. – С. 277-282.
12. Стиган И. Справочник по специальным функциям / И. Стиган. – М. : Изд-во "Наука", 1979. – 81 с.

13. Корбутяк Д.В. Телурид кадмію: домішково-дефектні стани та детекторні властивості / Д.В. Корбутяк, С.В. Мельничук, Є.В. Корбут, М.М. Борисик. – К. : Вид-во "Іван Федоров", 2000. – 198 с.

14. Jayaraman A. Temperature – induced Explosive First – Order Electronic Phase Transition in Cd-Doped SmS / A. Jayaraman, E. Bucher, P.D. Dernier, L.D. Longinotti // Phys. Review Letters. – 1973. – Vol. 31, № 11. – PP. 700-703.

15. Chris G. Band lineups and deformation potentials in the model-Solid theory / G. Chris, Van de Walle // Physical Review B. – 1989. – Vol. II, № 5. – PP. 1873-1883.

16. Судзуки Т. Динамика дислокаций и пластичность : пер. с англ. / Т. Судзуки, Х. Еси-нага, С. Такеути. – М. : Изд-во "Мир", 1989. – 294 с.

17. Комарь В.К. Монокристаллы группы A^2B^6 . Выращивание, свойства, применение / В.К. Комарь, В.М. Пузиков. – Харьков : Ин-т монокристаллов, 2002. – 241 с.

Баран М.М., Васькович И.М. Энергия дна зоны проводимости в кристалле с краевой дислокацией с самосогласованным учетом электрон-деформационного взаимодействия

Исследовано влияние самосогласованного электрон-деформационного потенциала при различных значениях концентрации электронов проводимости на значения краев разрешенных зон (края зоны проводимости $E_c(\rho, \theta)$) в окрестности краевой дислокации.

Ключевые слова: электрон-деформационный потенциал, концентрация электронов проводимости, зона проводимости, краевая дислокация.

Baran M.M., Vaskovich I.M. Energy of bottom of conductivity area in crystal with edge dislocation with self-consistent recognition of electron-deformational interaction

The influence of self-consistent electron-deformational potential with different values of concentration of conduction electrons on values of edges of settled areas (edge of conduction area $E_c(\rho, \theta)$) within edge dislocation is investigate.

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

УДК 330.45

*Доц. Б.Ю. Кишакевич, канд. екон. наук –
Дрогобицький ДПУ ім. Івана Франка*

**ОЦІНКА РІВНЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ КРЕДИТНОГО РИЗИКУ
ЗА ДОПОМОГОЮ ГОМОГЕННИХ МІР РИЗИКУ**

Проаналізовано традиційні підходи до обчислення рівня концентрації кредитного ризику портфеля та запропоновано методику оцінки диверсифікованості портфеля, яка враховує не лише обсяг кредитної заборгованості позичальника, але й його кредитоспроможність.

Ключові слова: концентрація кредитного портфеля, VaR, асимптотичні апроксимації Васічека, індекс Херфіндала-Хіршмана, міри кредитного ризику, багатофакторні моделі.

Актуальність проблеми. На сьогодні відомо багато мір концентрації кредитного портфеля: коефіцієнт концентрації, крива Лоренца, коефіцієнт Джіні, індекс Херфіндала-Хіршмана (Herfindahl-Hirschman Index, ННІ), багатофакторні моделі вимірювання ризику. Класичним методом визначення рівня концентрації кредитного портфеля є індекс Херфіндала-Хіршмана. У випадку визначення концентрації окремого позичальника індекс Херфіндала-Хіршмана (ННІ) матиме вигляд: