

立方体 AgCl 微晶中 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 引入的浅电子陷阱阱深与俘获截面的动力学模拟 *

杨少鹏[†] 傅广生 李晓苇 耿爱从 韩 理

(河北大学物理科学与技术学院, 保定 071002)

(2002 年 9 月 18 日收到 2003 年 1 月 27 日收到修改稿)

为了描述在晶体生长阶段掺入 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 的立方体 AgCl 微晶中光电子的产生与衰减过程, 建立了一种由三个固有中心和一个浅电子陷阱(SETs)组成动力学模型, 并引出一组微分方程. 通过求解微分方程得到与实验结果相符合的光电子衰减曲线及其寿命. 调整相关模拟参数, 在常温下得到由 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 引入的 SETs 阵深为 0.115eV, 电子俘获截面为 $2.136 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$.

关键词: 光电子, 浅电子陷阱, 俘获截面, AgCl 微晶

PACC: 0200, 0520D, 4270F

1. 引 言

电子陷阱技术对晶体材料特别是半导体材料的物理性能的改进具有非常重要的作用^[1-3]. 为了提高卤化银照相性能, 通常在微晶中掺入金属离子作为浅电子陷阱(SETs), 目前流行的是在卤化银中掺入 $M(\text{CN})_6^{4-}$, 其中 $M = \text{Fe}^{2+}, \text{Ru}^{2+}, \text{Co}^{2+}, \text{Rh}^{3+}, \text{Ir}^{3+}, \text{Cr}^{3+}$ (n 为 -2, -3 或 -4) 等. Hua 等人^[4,5] 利用瞬时微波光电导(transient microwave photoconductivity, TMPC)技术对掺有 $[\text{Ru}(\text{CN})_6]^{4-}$ 的 AgCl 微晶进行了研究, 结果发现 $[\text{Ru}(\text{CN})_6]^{4-}$ 降低了 TMPC 信号高度却延长了响应时间, 并在 120K 温度下得到了固有中心及由 $[\text{Ru}(\text{CN})_6]^{4-}$ 引入的 SETs 的俘获参数. 根据 Van den Eeden 理论^[6,7], 深的中心(包括深电子陷阱和复合中心)能降低 TMPC 信号高度并且缩短响应时间, 而空穴陷阱则使两者都减小. 因此实验观察到的现象应该是 SETs 的作用, 即 $[\text{Ru}(\text{CN})_6]^{4-}$ 掺杂剂引入了 SETs. 在卤化银晶体中掺入 SETs 掺杂剂, 在晶体中形成 SETs. SETs 可以起暂时储存电子的作用, 使这些电子既不会立即与光空穴复合而消耗掉, 也不会形成许多不起催化作用的次潜影互相竞争而归于无效, 陷阱的深度又不足

以将电子永久俘获. 电子在适当时候可以迁徙到潜影浓集中心, 使某个次潜影中心长大, 这样就延长了其光电子寿命, 提高了光电子的利用率. 若想充分理解 SETs 的效应, 利用 SETs 的俘获电子的作用来提高乳剂的感光性能, 必须先弄清 SETs 的密度、结构、阱深、俘获截面等相关参数. 然而迄今为止, 用实验方法如 TMPC 技术^[8,9]、电子顺磁共振(EPR)技术^[10-13]以及电子核双共振(ENDOR)技术^[14-18]等都未能得到这些信息. 本文运用计算机模拟得到了实验不能得到的 SETs 的信息. 在此模拟中, 首先建立一种模型产生一组描述动力学过程的微分方程, 然后通过解微分方程得到了掺有 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 的 AgCl 微晶中光生电子的衰减过程. 该程序能够快速准确地得到与实验相符合的光生电子衰减曲线及其衰减寿命, 并且在此程序的辅助下, 进行 SETs 俘获参数对 AgCl 微晶光生电子信号高度及其寿命影响的研究, 另外通过调整其他模拟参数还可得到许多重要结论.

2. 立方体 AgCl 乳剂的光电子衰减动力学模型

为了描述均匀掺有 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 络合物的边长

* 国家教育部科学技术研究重点项目(批准号 01011)及河北省教育厅科研计划项目(批准号 2002153)资助的课题.

† E-mail: shaopengyang@yahoo.com.cn

0.7 μm 立方体 AgCl 微晶中的光电子信号,首先建立一个由 AgCl 乳剂固有中心和掺杂剂引入的 SETs 组成的模型(如图 1 所示),其中固有中心包括两种类型的电子陷阱和一种空穴复合中心(空穴首先在这里被俘获,然后再与自由电子复合).其中 ΔE_{el} , ΔE_{e2} , ΔE_{r} , ΔE_{s} 分别表示深电子陷阱、较浅电子陷阱、复合中心,以及掺杂剂引入的 SETs 的阱深. β_{el} , β_{e2} , p_{r} , β_{s} 分别表示深电子陷阱、较浅电子陷阱、复合中心,以及 SETs 俘获电子的速率常数. N_{el} , N_{e2} , P_{r} , N_{s} 分别表示深电子陷阱、较浅电子陷阱、复合中心,以及 SETs 的态密度.用 TMPC 技术研究纯 AgCl 乳剂已经得到固有中心的俘获参数,并且作为此模拟中的输入参数.假设 AgCl 乳剂固有中心与掺杂剂引入的 SETs 之间无相互作用.AgCl 晶体每吸收一个光子,便将价带中的一个电子激发到导带,并在价带中留下一个空穴.设在 AgCl 晶体中单位时间、单位体积内导带中所产生的自由光电子数为 G_n ,而价带中产生的空穴数为 G_p ,则 $G_n = G_p = G$, G 称为光生自由电子-空穴对产生速率.设 R_n 为自由光电子的衰减速率,即 AgCl 晶体中单位时间、单位体积内导带中所消失的自由光电子数,相应的 R_p 是自由空穴的衰减速率.在我们的模型中,自由电子的衰减可以分为 4 部分, $R_n = R_{\text{el}} + R_{\text{e2}} + R_s + R_r$, R_{el} , R_{e2} , R_s , R_r 分别表示单位时间单位体积内导带中由于深电子陷阱俘获、参与潜影形成、浅电子陷阱俘获、复合而减少的电子数.同理, $R_p = R'_r$, R'_r 表示单位时间单位体积内价带中由于复合而减少的空穴数.因此能带中自由电子和自由空穴随时间的变化为

$$\frac{dn}{dt} = G - R_n, \quad \frac{dp}{dt} = G - R_p. \quad (1)$$

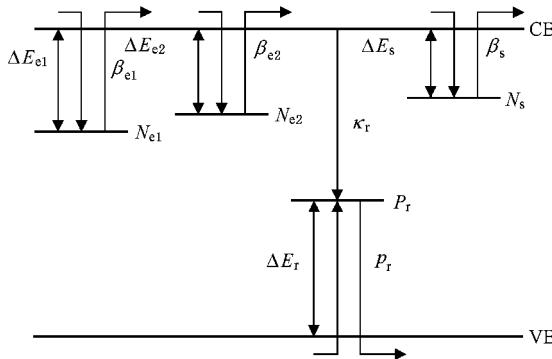


图 1 由 AgCl 乳剂固有中心和掺杂剂引入的 SETs 组成的模型

首先讨论电子陷阱引起的自由光电子衰减的情

况.电子陷阱可以用禁带中电子的局部能级 E_t 表示.设 N_e 为电子陷阱的总浓度, n_e 为被电子填满的陷阱浓度即束缚态电子的浓度,则未填充的陷阱浓度为 $N_e - n_e$,那么陷阱从导带俘获电子的速率为

$$R_c = \beta_e (N_e - n_e) n, \quad (2)$$

其中 β_e 为陷阱俘获电子的速率系数; n 为导带中自由电子浓度.其逆过程即电子从陷阱逸出至导带的热反俘获速率为

$$R'_c = \beta'_e n_e, \quad (3)$$

β'_e 为反俘获速率系数.在热平衡下, $n = n_0 = N_c \exp[-(F - E_c)/kT]$,又有 $(N_e - n_e)/n_e = \exp[-(E_t - F)/kT]$,其中 F 为费米能级, N_c 为导带的有效态密度,且在热平衡下 $R'_c = R_c$,则

$$\beta'_e = \beta_e N_c \exp\left[-\frac{E_c - E_t}{kT}\right], \quad (4)$$

其中 E_c 为导带能级, E_t 为束缚态能级,因而 $E_c - E_t$ 正是陷阱深度 ΔE_e ,因此电子陷阱的总俘获速率为

$$\frac{dn_e}{dt} = R_c - R'_c = \beta_e (N_e - n_e) n - \beta_e N_c n_e \exp\left[-\frac{\Delta E_e}{kT}\right]. \quad (5)$$

同理,对于复合中心,除了相应的上述两项,即空穴的俘获速率和反俘获速率外,还有复合中心从导带俘获电子的速率 $\kappa_r p_r n$,因此根据此模型可以建立如下一组微分方程,它描述光电子的产生、俘获、反俘获和复合过程的动力学:

$$\frac{dn}{dt} = G - \frac{dn_{\text{el}}}{dt} - \frac{dn_{\text{e2}}}{dt} - \kappa_r p_r n - \frac{dn_s}{dt}, \quad (6)$$

$$\frac{dn_{\text{el}}}{dt} = \beta_{\text{el}} (N_{\text{el}} - n_{\text{el}}) n - \beta_{\text{el}} N_c n_{\text{el}} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{el}}}{kT}\right), \quad (7)$$

$$\frac{dn_{\text{e2}}}{dt} = \beta_{\text{e2}} (N_{\text{e2}} - n_{\text{e2}}) n - \beta_{\text{e2}} N_c n_{\text{e2}} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{e2}}}{kT}\right), \quad (8)$$

$$\frac{dn_s}{dt} = \beta_s (N_s - n_s) n - \beta_s N_c n_s \exp\left(-\frac{\Delta E_s}{kT}\right), \quad (9)$$

$$\frac{dn_r}{dt} = \rho_r (P_r - p_r) p_r - \rho_r N_v p_r \exp\left(-\frac{\Delta E_r}{kT}\right) - \kappa_r p_r n, \quad (10)$$

$$\frac{dp}{dt} = G - \left(\frac{dp_r}{dt} + \kappa_r p_r n\right), \quad (11)$$

其中 G 为光生自由电子-空穴对的产生速率($\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$), t_p 为曝光时间(s), I 为曝光强度,表示每立方

厘米 AgCl 晶体中吸收的光子数,在曝光过程中, $G = I/t_p$, 曝光以后, $G = 0$; N_{el} , N_{e2} , P_r 分别为三种固有中心的浓度; n 和 p 分别为导带中的自由电子浓度和价带中的空穴浓度; β_{el} , β_{e2} , ρ_r , κ_r 分别为两种固有电子陷阱俘获自由电子、固有复合中心俘获空穴和复合自由电子的速率系数($\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$); S_{el} , S_{e2} , S_{th} , S_r 分别为两种固有电子陷阱中心俘获自由电子、固有复合中心俘获空穴和复合自由电子的俘获截面(nm^2); ΔE_{el} , ΔE_{e2} , ΔE_r 分别为三种固有中心的阱深(eV); n_{el} , n_{e2} , n_s , p_r 分别为被俘获在两种固有电子陷阱中的电子浓度、被俘获在 SETs 中的电子浓度和被俘获在固有复合中心的空穴浓度(cm^{-3}); N_s , β_s , S_s , ΔE_s 分别为由掺杂剂引入的 SETs 的浓度、俘获速率系数、俘获截面和陷阱深度; k , T 分别为玻尔兹曼常数和温度; N_c , N_v 分别为导带和价带的有效密度, 其表达式分别为

$$N_c = \frac{2\pi m_e k T}{12\pi\hbar^2}, \quad N_v = \frac{2\pi m_h k T}{12\pi\hbar^2}. \quad (12)$$

将各种常数都代入(12)式, 则

$$N_{e,h} = 2.51 \times 10^{19} \left(\frac{m_{e,h}}{m_0} \right)^{3/2} \left(\frac{T}{300} \right)^{3/2} \text{cm}^{-3}. \quad (13)$$

电子在某一中心被俘获的比例系数(如 β_{el})是相应的俘获截面(S_{el})和电子热运动速度(v_e)的乘积; 同样地对于空穴, ρ_r 为 S_r 和 v_h 的乘积. 电子、空穴的热运动速率计算方法如下:

$$v_e = [3kT/m_e]^{1/2}, \quad v_h = [3kT/m_h]^{1/2},$$

其中 m_e 和 m_h 分别为导带中电子和价带中空穴的有效质量, 它们不同于自由电子的静止质量 m_0 ($= 9.1094 \times 10^{-31} \text{ kg}$).

模型中已含有如下几点假设. 即使是这样一个简单的模型, 仍可以研究光生空穴和光生电子的衰减动力学.(1)电子被均匀地由价带激发到导带.(2)在一个晶体中衰减的光生电子和光生空穴具有同样的俘获特性.(3)忽略空间电荷认为电中性.(4)忽略扩散运动.(5)晶体分布均匀.(6)晶体被均匀掺杂.

3. 计算方法

为了模拟掺杂 AgCl 中光生载流子的衰减过程, 必须求出以上 6 个方程的数值解, 此方程组满足 $M'_y = F(x, y)$ 形式, 其中 x 对应时间 t , y 对应 n , n_{el} , n_{e2} , n_s , p_r 和 p , M 为雅可比行列式. 求解 $M'_y =$

$F(x, y)$ 已经有了成熟的 Fortran 程序 RADAU^{5[19]}, 有了此程序我们所做的是编写一个驱动程序和相关的子程序求出 $n(t)$ 的延迟曲线, 即得到光生电子的衰减过程. 其中驱动程序结构如下:

第一步 首先从键盘或从文件中读取输入参数, 其中 AgCl 乳剂固有中心的俘获参数由实验数据得到, 而 SETs 的俘获参数是我们设定的, 且可以调整以得到与实验相符合的结果; 另外还有一些常数值如终止时间(初始时间默认为零)、公差(一般取 10^{-4})、初始曝光时间 t_b 、曝光时间 t_p 、曝光强度 I 等.

第二步 取定初始值 $y_j(0)$, 其中 $j = 1, 2, 3, 4, 5, 6$ 分别对应 n , n_{el} , n_{e2} , n_s , p_r 和 p 的初始值. 取初始时间步长为曝光时间的 1%.

第三步 调用 RADAU5 子程序求得方程组的解, 在运行中寻找出两组数值(a)时间 t_m , 此时对应着 $n(t)$ 达到最大值, 自由光电子信号为最高点 V_m (b)时间 t_d , 此时 V_m 衰减为 V_m/e .

第四步 计算并输出自由光电子信号随时间衰减的曲线, 进而得到自由光电子衰减时间.

我们感兴趣的是光电子衰减时间随掺杂浓度的变化, 调整 SETs 的输入参数使得输出结果与实验数据相符合, 就可分析由掺杂剂 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 引入的 SETs 的效应.

通过以上的模拟程序, 不仅可以证明掺有 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 络合物的 AgCl 微晶中 SETs 的存在, 而且能够估计出这些电子陷阱的深度及俘获截面, 从而为研究 SETs 掺杂剂对电子的俘获作用以及对乳剂感光性能的影响提供理论依据.

4. 光电子产生和衰减过程的数值模拟及其与实验结果的拟合

4.1. AgCl 基本乳剂的模拟

在模拟过程中, 对于纯 AgCl 晶体固有中心的参数如表 1 所示. 其中 S_{el} , S_{e2} , S_{th} , S_r 参照文献 4 利用 TMPC 技术对纯 AgCl 晶体的研究结果, 因为俘获截面与温度的二次方成反比, 因此将原来所得的数据(120K 下)都乘上 0.16 便得到常温下固有中心的俘获截面. 利用微波介电谱检测装置(测量方法见文献[20])对我们制备的样品进行测量, 结果测出纯 AgCl 样品自由电子的衰减时间为 197ns, 调节固有

中心浓度,使模拟的自由光电子衰减时间也等于197ns,由此得到固有中心的浓度。掺杂剂引入的SETs的密度已知,调整俘获截面和电子陷阱深度以得到与实验相符合的数据,由此得到掺杂剂引入的SETs的俘获截面和电子陷阱深度。在此基础上,模拟不同掺杂浓度的AgCl乳剂中自由电子的衰减时间,最后得到最佳的参数。

表2为实验测出的不同掺杂浓度下的自由电子衰减时间,当K₄Fe(CN)₆掺杂浓度为1×10⁻⁶mol时

表1 基本乳剂的固有中心的俘获参数表

参数	电子陷阱1	参数	电子陷阱2	参数	THFE复合中心
N _{el} /cm ⁻³	6.08×10 ¹⁶	N _{e2} /cm ⁻³	4.22×10 ¹⁷	P _r /cm ⁻³	3.89×10 ¹⁷
S _{el} /cm ² s ⁻¹	9.92×10 ⁻⁴	S _{e2} /cm ² s ⁻¹	2.56×10 ⁻⁵	S _{th} /cm ² s ⁻¹	4.32×10 ⁻⁵
ΔE _{el} /eV	0.20	ΔE _{e2} /eV	0.5	S _r /cm ² s ⁻¹	2.88×10 ⁻⁶
				ΔE _r /eV	0.5

表2 实验测出的自由光电子衰减时间随掺杂浓度的变化

掺杂浓度/10 ⁻⁶ mol	0	0.05	0.1	0.5	1	5
衰减时间/ns	197	212	232	250	270	205

表3 立方体AgCl基本乳剂热速率、价带和导带有效密度参数表

参数	V _e (cm/s)	V _h (cm/s)	价带有效密度/cm ⁻³	导带有效密度/cm ⁻³	温度/K
计算	1.78105×10 ⁷	2.61153×10 ⁶	2.24434×10 ²¹	7.07533×10 ¹⁸	300

4.2. 掺有SETs的乳剂的模拟与拟合

为了较精确地确定SETs的阱深及俘获截面等参数,进行如下计算步骤:

第一步 首先将掺杂浓度固定在1×10⁻⁶mol,在0.05—0.15eV范围内,即在SETs范围内调整俘获截面,得到自由电子衰减时间,如表4所示。(其中

自由电子衰减时间达到最大,而掺杂浓度大于和小于1×10⁻⁶mol时自由电子衰减时间比掺杂浓度为1×10⁻⁶mol时都有所下降。总之,不管掺杂多少,乳剂的光电子衰减时间比未掺杂时的都要高,这说明了K₄Fe(CN)₆掺杂剂是一种有效的浅电子陷阱掺杂剂。固有中心的俘获截面已知,乘以热运动速率得到比例系数 $\beta_{el}, \beta_{e2}, p_r, \kappa_r = (2\pi mkT/h^2)^{3/2}$,见表3。

俘获截面的单位为cm⁻²,电子陷阱深度的单位为eV,衰减时间的单位为ns。"—"表示衰减时间超过500ns(这不可能,所以大于500ns后程序并未模拟)。实验得到掺杂浓度在1×10⁻⁶mol时衰减时间为270ns。由表4可以看出,俘获截面小于10⁻¹⁸cm²时衰减时间太短,不可取。

表4 掺杂浓度1×10⁻⁶mol时自由电子衰减时间(ns)随SETs阱深E_s(eV)、俘获截面S_s(cm²)的变化

S _s \ E _s	0.05	0.06	0.07	0.08	0.09	0.10	0.11	0.12	0.13	0.14	0.15
1.4×10 ⁻¹⁸	202.65	203.35	202.3	199.15	190.05	194.6	186.2	183.05	180.25	179.2	177.8
1.4×10 ⁻¹⁷	205.95	208.25	212.1	218.05	225.05	234.5	244	250	243	208	155
1.4×10 ⁻¹⁶	205.8	210	215.6	220.85	228.55	238.7	252.7	268.45	287.35	304.3	311.5
1.4×10 ⁻¹⁵	205.7	210.7	217	224.455	231.875	242.06	255.34	273	293.16	313.81	328.16
1.4×10 ⁻¹⁴	209.85	212.45	219.1	229.6	243.6	260.33	278.95	302.4	330.4	361.2	389.55
1.4×10 ⁻¹³	207.55	212.8	225.75	231.35	247.8	272.65	310.1	367.15	453.2	—	—
1.4×10 ⁻¹²	207.55	212.8	220.5	231.7	248.15	273.7	313.25	375.9	479.9	—	—
1.4×10 ⁻¹¹	207.55	213.15	220.5	231.7	248.5	274.4	313.6	376.95	483	—	—
1.4×10 ⁻¹⁰	207.9	213.15	220.5	231.7	248.5	274.05	313.95	376.6	483.7	—	—

第二步 从表 4 选定自由电子衰减时间在 270ns 附近的俘获截面和陷阱深度, 调整掺杂浓度得到自由电子衰减时间, 如表 5 所示。“-”表示衰减时间超过 500ns. 与实验数据比较, 掺杂浓度高于 5×10^{-6} mol 时衰减时间开始下降, 而俘获截面大于 10^{-16} cm^{-2} 时衰减时间随掺杂浓度一直增加, 不可取. 因此, 俘获截面应在 10^{-16} — 10^{-17} cm^{-2} , 而陷阱深度应在 0.11—0.12eV 之间.

表 5 陷阱深度 0.09—0.12eV 时自由电子衰减时间(ns)

俘获参数	掺杂浓度/ 10^{-6} mol	0.05	0.1	0.5	1	5
		实验得到的衰减时间/ns	212	232	250	270
$S_s = 1.4 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$	$E_s = 0.12 \text{ eV}$	203.35	209.65	250	54.95	54.95
$S_s = 1.4 \times 10^{-16} \text{ cm}^2$	$E_s = 0.11 \text{ eV}$	205.45	212.45	252.7	284.55	278.145
$S_s = 1.4 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$	$E_s = 0.11 \text{ eV}$	206.5	214.9	255.34	292.88	381.85
$S_s = 1.4 \times 10^{-14} \text{ cm}^2$	$E_s = 0.09 \text{ eV}$	201.95	206.15	243.6	288.68	-
$S_s = 1.4 \times 10^{-13} \text{ cm}^2$	$E_s = 0.09 \text{ eV}$	201.95	207.2	247.8	302.4	-
$S_s = 1.4 \times 10^{-12} \text{ cm}^2$	$E_s = 0.09 \text{ eV}$	202.3	207.2	248.15	303.45	-
$S_s = 1.4 \times 10^{-11} \text{ cm}^2$	$E_s = 0.09 \text{ eV}$	202.3	207.2	248.5	303.8	-
$S_s = 1.4 \times 10^{-10} \text{ cm}^2$	$E_s = 0.09 \text{ eV}$	202.3	206.85	248.5	303.6	-

第三步 在指定的范围内调整陷阱的俘获截面和阱深, 在 $S_s = 3.65 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$, $E_s = 0.115 \text{ eV}$ 时得到与实验数据最相近的一组数据, 如表 6 和图 2 所示.

至此, 可以认为掺杂剂 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 络合物引入的 SETs 阵深约为 0.115eV, 其俘获截面约为 $3.65 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$.

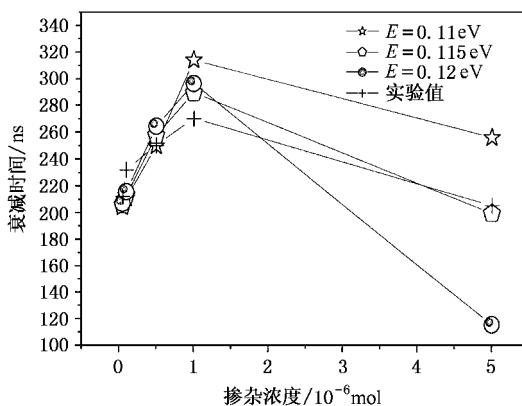


图 2 不同 SETs 阵深下光电子寿命随掺杂浓度的变化

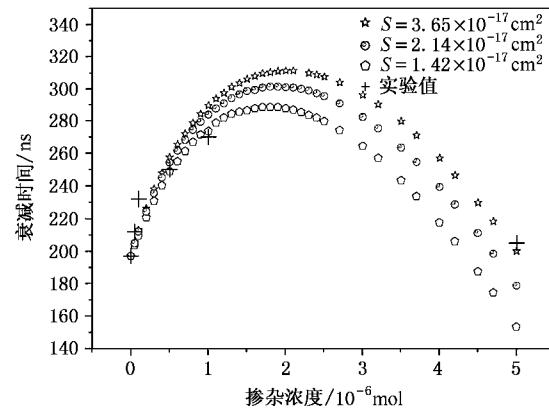
表 6 优化的阱深和俘获截面下的实验与模拟数据

浓度/ 10^{-6} mol	0.05	0.1	0.5	1	5
	时间 / ns	实验数据	模拟数据	实验数据	模拟数据
0.05	212	205.45	212.8	250	257.25
0.1	232	212.8	205.45	270	289.1
0.5	250	257.25	205.45	205	199.15
1	270	289.1	257.25	205	199.15
5	205	199.15	257.25	205	212.8

第四步 $\Delta E_s = 0.115 \text{ eV}$ 时, 微调俘获截面值 S_s 在 $3.65 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ 附近, 从 1×10^{-17} 到 4×10^{-17}

10^{-6} mol 时衰减时间开始下降, 而俘获截面大于 10^{-16} cm^{-2} 时衰减时间随掺杂浓度一直增加, 不可取. 因此, 俘获截面应在 10^{-16} — 10^{-17} cm^{-2} , 而陷阱深度应在 0.11—0.12eV 之间.

cm². 改变掺杂浓度, 计算出自由电子衰减时间(如图 3). 当俘获截面值为 $1.424 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ 时, 掺杂浓度大于 2×10^{-6} mol 时的衰减时间模拟值与实验值相差较大; 当俘获截面值为 $3.65 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ 时, 掺杂浓度 1×10^{-6} mol 时的衰减时间模拟值与实验值也有较大误差. 捕获截面值为 $2.136 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ 时, 衰减时间模拟值与实验值符合最好.

图 3 $E_s = 0.115 \text{ eV}$, 不同 SETs 俘获截面下光电子衰减时间随掺杂浓度变化的实验与模拟对比图

5. 结 论

综上所述, 立方体 AgCl 乳剂中掺杂 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ 的 SETs 阵深为 0.11—0.12eV, 最佳值为 0.115eV; 俘获截面为 1.424×10^{-17} — $3.65 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$, 最佳值为 $2.136 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$.

- [1] Liu H X , Zheng X F and Hao Y 2002 *Acta Phys . Sin .* **51** 163 (in Chinese) 刘红侠、郑雪峰、郝 跃 2002 物理学报 **51** 163]
- [2] Lu L W *et al* 2002 *Acta Phys . Sin .* **51** 372 (in Chinese) 卢励吾 等 2002 物理学报 **51** 372]
- [3] Liu B *et al* 2001 *Acta Phys . Sin .* **50** 1627 (in Chinese) 刘 波 等 2001 物理学报 **50** 1627]
- [4] Hua J P *et al* 1999 *J . Imaging Sci .* **47** 71
- [5] Hua J P *et al* 2000 *J . Phys . D : Appl . Phys .* **33** 574
- [6] Van Den Eeden M *et al* 1994 *J . Imaging Sci .* **38** 475
- [7] Van Den Eeden M *et al* 1995 *J . Imaging Sci .* **39** 393
- [8] Müssig Th *et al* 1994 *J Imaging Sci . Technol .* **38** 526
- [9] Müssig Th 1997 *J . Imaging Sci . Technol .* **41** 118
- [10] Eachus R S *et al* 1989 *Phys . Stat . Sol . b* **152** 583
- [11] Brescia J Z *et al* 1987 *Cryst . Latt . Def . Amorph . Mat .* **17** 69
- [12] Kanzaki H and Sakuragi S 1973 *Photogr . Sci . Eng .* **17** 69
- [13] Sakuragi S and Kanzaki H 1977 *Phys . Rev . Lett .* **38** 1320
- [14] Olm M T *et al* 1994 *Proc . 47th Ann . Conf . Imaging Sci . & Technol .* (New York) pp 71—74
- [15] Bennetbroek M T *et al* 1996 *Phys . Rev . B* **54** 1276
- [16] Bennetbroek M T *et al* 1997 *J . Phys . : Condens . Matter* **9** 3227
- [17] Vercammen H *et al* 1997 *Proc . Imaging Sci . & Technol . / Soc . Photogr . Sci . & Technol .* (Japan) p 125
- [18] Vercammen H *et al* 1998 *Proc . Int . Conf . Photographic Sci . (ICPS)* (Antwerp) p 76
- [19] Hairer E *et al* 1996 *Solving Ordinary Differential Equations Stiff and Differential-Algebraic Problems* Springer Series in Comput . Math . vol 14 2nd ed
- [20] Yang S P , Li X W , Han L and Fu G S 2002 *Chin . Phys . Lett .* **19** 429

The kinetics simulation of trap depths and capture cross sections of SETs in AgCl microcrystals doped with $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ complex ^{*}

Yang Shao-Peng[†] Fu Guang-Sheng Li Xiao-Wei Geng Ai-Cong Han Li

(College of Physics Science and Technology , Hebei University , Baoding 071002 , China)

(Received 18 September 2002 ; revised manuscript received 27 January 2003)

Abstract

To describe the photoelectron rise and decay process of AgCl microcrystals doped with $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$, a kinetics model composed of three intrinsic centres and a shallow electron traps (SETs) is set up , and further more , a set of differential equations is deduced . By solving the differential equations , photoelectron decay curve and photoelectron lifetime that is in accord with the transient microwave photoconductivity experimental data are obtained . Adjusting related simulation parameters , the SET depths and capture cross sections at room temperature for $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$ are obtained and they are 0.115 eV and $2.136 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$, respectively .

Keywords : photoelectron , shallow electron traps , capture cross sections , AgCl microcrystals

PACC : 0200 , 0520D , 4270F

^{*} Project supported by the Foundation for Science and Technology Research Program from the Ministry of Education of China (Grant No. 01011) , and the Foundation for Science and Technology Research Program from the Education Bureau of Hebei Province , China (Grant No. 2002153) .

[†]E-mail : shaopengyang@yahoo.com.cn