

2. Zayachuk D.M., Slobodskyy T., Astakhov G.V., Slobodskyy A., C. Gould G. Schmidt, W. Ossau, L.W.Molenkamp/ *Phys. Rev. B*. – 2011 – v. 8, – P. 085308.
3. Zayachuk D.M. / *Journal of Luminescence*. – 2011. – v. 131, Issue 8. – P.1696 .
4. Давыдов А.С.. *Квантовая механика*. М.: Наука, 1973. – 703 с.
5. Ландау Л.Д., И.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. М.: ГИЗ физ.-мат. Лит. – 1963. – 703 с.
6. Вакарчук І.О. *Квантова механіка.. Львів.: вид-во Львівського держ. університету ім. І. Франка, 1998. – 614 с.*
7. Товстюк К.К., Прийма Ю.В., Дума М.В / *Вісник Нац. ун-ту “Львівська політехніка”*. – *Електроніка*. – Львів, 2011. – № 708. – С.168.

УДК 621.315.592

Я.С. Буджак

Національний університет “Львівська політехніка”,  
кафедра напівпровідникової електроніки

## КІНЕТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ КРИСТАЛІВ З ІЗОТРОПНИМИ ЗАКОНАМИ ДИСПЕРСІЇ

© Буджак Я.С., 2013

Ya. S. Budzhak

## KINETIC PROPERTIES OF SEMICONDUCTOR CRYSTAL WITH ISOTROPIC DISPERSION LAW

© Budzhak Ya. S., 2013

Показано, що важливі кінетичні властивості провідних кристалів спричинені умовами дрейфу носіїв зарядів міжвузлями кристалічної ґратки.

*Ключові слова:* напівпровідниковий кристал, транспортні властивості, кінетичні коефіцієнти, закон дисперсії Кейна.

In this paper it is shown that the important kinetic properties of the conducting crystals are determined by the conditions of the charge carriers drift throw the interstitials of the crystal lattice.

*Key words:* semiconductor crystal, transport properties, kinetic coefficients, Keyn's dispersion law.

### Постановка проблеми

Провідний кристал, в якому існують потоки електрики і теплоти, характеризується великим термодинамічним потенціалом Гіббса [1–3]:

$$\Omega = -2kT \sum_p \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{m + \Delta e_p - e_p}{kT} \right) \right] \quad (1)$$

У цій формулі  $T$  – температура кристала,  $k$  – стала Больцмана,  $\mathbf{F}_{\vec{p}} = \mathbf{F}(\vec{p})$  – закон дисперсії носіїв зарядів у кристалі,  $\vec{p}$  – квазіімпульс носія заряду,  $\Delta \varepsilon_{\vec{p}} = \Delta \varepsilon(\vec{p})$  – зміна енергії носія заряду під дією збурень, які виводять кристал із стану термодинамічної рівноваги,  $\mu$  – хімічний потенціал носіїв зарядів.

Користуючись формалізмами статистичної механіки та термодинаміки, розрахуємо загальну кількість носіїв зарядів  $N$  у кристалі, їхню ентропію  $S$  та її швидкість зміни  $\frac{dS}{dt}$

$$: \quad N = - \left( \frac{d\Omega}{d\mu} \right)_{\mathbf{r}} = 2 \sum_{\vec{p}} f_{\vec{p}} \quad (2)$$

$$S = - \left( \frac{d\Omega}{dT} \right)_{\mu} \quad (3)$$

$$\frac{dS}{dt} = - \frac{d}{dt} \left( \frac{d\Omega}{dT} \right)_m = \frac{1}{T} \left( \mathbf{J} \cdot \mathbf{E} - \frac{\mathbf{q} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} T}{T} \right) \geq 0 \quad (4)$$

У цих формулах для зручності записів введені такі позначення:

$$\vec{j} = 2ze \left( \frac{N}{V} \right) \frac{\sum_{\vec{p}} \nabla_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p}) f_{\vec{p}}}{\sum_{\vec{p}} f_{\vec{p}}} \quad (5)$$

$$\vec{q} = 2 \left( \frac{N}{V} \right) \frac{\sum_{\vec{p}} (\varepsilon(\vec{p}) - \mu) \nabla_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p}) f_{\vec{p}}}{\sum_{\vec{p}} f_{\vec{p}}} \quad (6)$$

$$f_{\vec{p}} = \frac{1}{\left[ \exp \left( \frac{\varepsilon(\vec{p}) - \Delta \varepsilon(\vec{p}) - \mu}{kT} \right) + 1 \right]} \quad (7)$$

В алгоритмах (4)–(7)  $\mathbf{E}$  – вектор напруженості електричного поля,  $\nabla_{\mathbf{r}} T$  – градієнт температури,  $\vec{j}$  – вектор густини електричного струму,  $\vec{q}$  – вектор густини теплового потоку в кристалі,  $V$  – об'єм кристала,  $f_{\vec{p}}$  – одночастинкова нерівноважна функція розподілу, на якій ґрунтується статистична теорія кінетичних властивостей кристалів. За відсутності дрейфових збурень у кристалі  $\Delta \varepsilon(\vec{p}) \equiv 0$  [1,2], тому за таких умов спостереження  $f_{\vec{p}}$  дорівнює відомій рівноважній функції Фермі-Дірака  $f_0$ . У цитованих роботах описані методи розрахунку збурення  $\Delta \varepsilon(\vec{p})$ , та наведена його аналітична формула, яка показує, що це збурення є непарною функцією векторів  $\vec{p}$ ,  $\mathbf{E}$  та  $\nabla_{\mathbf{r}} T$ .

Обґрунтована в цій роботі формула (4) збігається з відомою формулою нерівноважної статистичної термодинаміки, яку називають другим законом нерівноважної термодинаміки. Формули (5) і (6) в кінетичній теорії, відповідно, називають узагальненими рівняннями електропровідності та теплопровідності.

Якщо тепер в рівняння (5) і (6) підставити аналітичне значення  $\Delta \varepsilon(\vec{p})$ , за умови, що в кристалі одночасно існують градієнтні температури  $\nabla_{\mathbf{r}} T$ , електричне поле з напруженістю  $\mathbf{E}$  і магнітне поле з вектором індукції  $\mathbf{B}$ , то вони набувають такого вигляду:

$$\vec{j} = (\mathbf{s}_{ij}(\mathbf{B})) \mathbf{E} + (\mathbf{b}_{ij}(\mathbf{B})) \nabla_{\mathbf{r}} T \quad (8)$$

$$\vec{q} = (\mathbf{n}_{ij}(\mathbf{B})) \mathbf{E} + (\mathbf{h}_{ij}(\mathbf{B})) \nabla_{\mathbf{r}} T \quad (9)$$

Коефіцієнти  $(\mathbf{s}_{ij}(\mathbf{B}))$ ,  $(\mathbf{b}_{ij}(\mathbf{B}))$ ,  $(\mathbf{n}_{ij}(\mathbf{B}))$ ,  $(\mathbf{h}_{ij}(\mathbf{B}))$  – це тензори кінетичних коефіцієнтів, які певним способом характеризують багато матеріальних властивостей провідних кристалів. За наявності магнітного поля в кристалі ці коефіцієнти завжди є тензорами другого рангу, а у випадку

слабкого магнітного поля, або у його відсутності вони можуть вироджуватися в скаляри для ізотропних кристалів, тобто  $(s_{ij}(0)) \rightarrow s(d_{ij}) = s, \dots (h_{ij}(0)) \rightarrow h(d_{ij}) = h$ .

**Мета дослідження**

Визначення тензорів кінетичних коефіцієнтів, які входять в рівняння (5) і (6), для ізотропних кристалів в слабкому магнітному полі показали, що питомий опір кристала  $\rho(\mu^*, T)$ , коефіцієнт Холла  $R(\mu^*, T)$ , коефіцієнт Нернста-Етінгсгаузена  $N(\mu^*, T)$ , питома теплопровідність носіїв зарядів  $\chi(\mu^*, T)$ , холлівська рухливість носіїв зарядів  $U_H(\mu^*, T) = \left| \frac{R(\mu^*, T)}{\rho(\mu^*, T)} \right|$ , рухливість дрейфу  $U_D(\mu^*, T)$  та концентрація носіїв струму  $n$  в кристалі описуються такими формулами:

$$\rho(\mu^*, T) = \frac{1}{en} \cdot \frac{J(0,0,\mu^*,T)}{J(0,1,\mu^*,T)} \tag{10}$$

$$R(\mu^*, T) = \frac{J(0,0,\mu^*,T)}{zen} \cdot \frac{J(0,2,\mu^*,T)}{J(1,1,\mu^*,T)^2} \tag{11}$$

$$\alpha(\mu^*, T) = \left( \frac{k}{ze} \right) \left[ \frac{J(1,1,\mu^*,T)}{J(0,1,\mu^*,T)} - \mu^* \right] \tag{12}$$

$$N(\mu^*, T) = \frac{k}{e} \left| \frac{R(\mu^*, T)}{\rho(\mu^*, T)} \right| \left[ \frac{J(1,1,\mu^*,T)}{J(0,1,\mu^*,T)} - \frac{J(1,2,\mu^*,T)}{J(0,2,\mu^*,T)} \right] \tag{13}$$

$$\chi(\mu^*, T) = \left( \frac{k}{e} \right)^2 \frac{\tau}{\rho(\mu^*, T)} \left[ \frac{J(2,1,\mu^*,T)}{J(0,1,\mu^*,T)} - \left( \frac{J(1,1,\mu^*,T)}{J(0,1,\mu^*,T)} \right)^2 \right] \tag{14}$$

$$U_H(\mu^*, T) = \frac{J(0,2,\mu^*,T)}{J(0,1,\mu^*,T)} \tag{15}$$

$$U_D(\mu^*, T) = \frac{J(0,1,\mu^*,T)}{J(0,0,\mu^*,T)} \tag{16}$$

$$n(\mu^*, T) = J(0,0,\mu^*, T) \tag{17}$$

У формулах (10)–(17) для розрахункових функціоналів використано таке позначення:

$$J(i,j,\mu^*, T) = \int_0^\infty \left( \frac{\varepsilon}{kT} \right)^i (u(\varepsilon, T))^j G(\varepsilon, T) \left( -\frac{df_0}{d\varepsilon} \right) d\varepsilon \tag{18}$$

Тут

$$G(\varepsilon, T) = \int_0^\varepsilon g(\varepsilon') d\varepsilon' \tag{18a}$$

де  $g(\varepsilon')$  – густина енергетичних рівнів у дозволеній зоні енергії, яка залежить від закону дисперсії  $\varepsilon_{\vec{p}} = \varepsilon(\vec{p})$ ;  $u(\varepsilon, T)$  – функція розсіювання з розмірністю рухливості, що описує вплив процесів розсіювання носіїв зарядів на дефектах кристалічної ґратки на кінетичні властивості кристала;  $f_0(\varepsilon, \mu^*)$  – функції у формі Дірака, яка залежить від приведеного хімічного потенціалу  $\mu^* = \frac{\mu}{kT}$ ,  $i, j$  – відомі числові показники функціонала (18).

Отже, в підсумку маємо, що універсальний функціонал (18) залежить від закону дисперсії носіїв зарядів у кристалі, від їх хімічного потенціалу  $\mu^*$ , та від дефектів кристалічної ґратки кристала, від яких залежить функція розсіювання  $u(\varepsilon, T)$ .

Загальний математичний аналіз цього функціонала [4] показує, що він відповідає такому відношенню:

$$\left( \frac{J(0,1,\mu^*,T)}{J(0,0,\mu^*,T)} \right)^2 \leq \frac{J(0,2,\mu^*,T)}{J(0,0,\mu^*,T)}$$

Тобто

$$f_R(\mu^*, T) = \frac{J(0,0,\mu^*,T)J(0,2,\mu^*,T)}{J(0,1,\mu^*,T)} \geq 1$$

Ця функція  $f_R(\mu^*, T)$  входить у вираз коефіцієнта Холла (11) і називається фактором розсіювання Холла. Вона дорівнює 1 для сильно вироджених носіїв зарядів, або коли функція розсіювання не залежить від їх енергії.

Формули (10)–(18) мають важливе значення для з'ясування природи різних кінетичних властивостей кристалів, а отже, їх можна використовувати для прогнозування синтезованих кристалів із заданими властивостями.

Для розв'язків задач прогнозування необхідно знати всі фізичні величини, від яких залежить функціонал (18), тобто треба знати закон дисперсії для носіїв струму в кристалі, їх хімічний потенціал  $\mu^*$  та функцію розсіювання.

Закон дисперсії  $\epsilon_{\vec{p}} = \epsilon(\vec{p})$  – це квантово-механічна проблема для кристала. Здебільшого для синтезованих напівпровідникових кристалів їх закони дисперсії з певним наближенням відомі. Для ізотропних кристалів – це можуть бути ізотропні параболічні закони дисперсії, або закони дисперсії Кейна. Якщо закон дисперсії для певного кристала відомий, то він залишається незмінним для різних зразків з різними умовами синтезування.

Хімічний потенціал  $\mu^*$ , від якого залежить функціонал (18), можна теоретично розрахувати за допомогою рівняння нейтральності, або за допомогою певних експериментальних вимірювань. Ця величина дуже сильно залежить від умов синтезу кристала і може змінюватись від зразка до зразка.

Функція розсіювання  $u(\epsilon)$  теж може змінюватися від зразка до зразка, бо вона залежить від природи і концентрації дефектів кристалічної ґратки, на яких відбувається розсіювання носіїв зарядів кристала під час їх руху в міжвузлях кристалічної ґратки. У зв'язку з цим функція розсіювання сильно залежить від умов синтезу кристала.

### Розв'язання поставленої задачі

Застосуємо розрахункові алгоритми (10) – (18) до напівпровідникових кристалів з ізотропними законами дисперсії Кейна :

$$\frac{p^2}{2m^*} = e + \frac{e^2}{E_G}; \text{ тобто } p = \sqrt{2m^* \left( e + \frac{e^2}{E_G} \right)} \quad (19)$$

де  $m^*$  – параметр ефективної маси носія заряду,  $E_G$  – ширина забороненої зони енергії.

Для такого закону дисперсії маємо:

$$G(e) = \frac{8p}{3h} p^3(e) = \frac{8}{3\sqrt{p}} \left( \frac{2pm^*}{h^2} \right)^{3/2} \left( e + \frac{e^2}{E_G} \right)^{3/2} \quad (20)$$

$$g(e) = \frac{dG(e)}{de} = \frac{4}{\sqrt{p}} \left( \frac{2pm^*}{h^2} \right)^{3/2} \left( e + \frac{e^2}{E_G} \right)^{1/2} \left( 1 + 2 \frac{e}{E_G} \right) \quad (21)$$

Квантово-механічні розрахунки засвідчують, що в ізотропних кристалах для важливих механізмів розсіювання функцію розсіювання  $u(e)$  можна описати такою формулою [5,6]:

$$u(e) = u_0^{(r)}(T) p^{(2r-3)} \left( \frac{de}{dp} \right)^2 = u_0^{(r)}(T) 2^{(r-1/2)} (m^*)^{(r-5/2)} \frac{\left( e + \frac{e^2}{E_G} \right)^{(r-1/2)}}{\left( 1 + \frac{e}{E_G} \right)^2} \quad (22)$$

де  $u_0^{(r)}(T)$  – відома для конкретного механізму розсіювання температурна функція, а  $r$  називається показником розсіювання і має такі значення:

$r = 0$  для розсіювання носіїв струму на акустичних фононах або точкових дефектах кристалічної ґратки,

$r = 1$  для розсіювання на оптичних фононах при температурах, вищих від температури Дебая,

$r = 2$  для розсіювання на іонах домішкових атомів у кристалі.

За допомогою формул (19)–(21) легко можна показати, що для закону дисперсії (18) універсальний функціонал  $J(l, j, m^{\bullet}, T)$  має таке значення:

$$\begin{aligned}
 J(l, j, m^{\bullet}, T) &= \int_0^{\infty} \left( \frac{e}{kT} \right)^l u(e)^j G(e) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial e} \right) de = \\
 &= N_c(T) \cdot U(r, T)^j \int_0^{\infty} x^l \frac{(x + b(T)x^2)^{(r-1/2)j+3/2}}{(1 + 2b(T)x)^{2j}} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) dx = \\
 &= N_c(T) \cdot U(r, T)^j \int_0^{\infty} x^l \frac{(x + b(T)x^2)^{(r-1/2)j+3/2}}{(1 + 2b(T)x)^{2j} \left( 2 \cosh \left( \frac{x - m^{\bullet}}{2} \right) \right)^2} dx \quad (23)
 \end{aligned}$$

У цій формулі використані такі позначення:

$$N_c(T) = \frac{8}{3\sqrt{p}} \left( \frac{2pm^{\bullet}kT}{h^2} \right)^{3/2}; U(r, T) = \left( \frac{U_a}{T} d(r, 0) + \frac{U_o}{T} d(r, 1) + U_i d(r, 2) \right) (m^{\bullet})^{(r-5/2)} T^{(r-5/2)},$$

$b(T) = \frac{kT}{E_G}$ ;  $d(x, y)$  – дельта функція Кронекера,  $U_a, U_o, U_i$  – відомі константи кристала, які

залежать від його природи та від механізмів розсіювання. Сама формула (23) дуже зручна для її використання в комп'ютерному пакеті MathCAD.

### Висновки

Значення фундаментального функціонала  $J(l, j, m^{\bullet}, T)$  за формулою (23) в розрахункових алгоритмах (10)–(18) концентрації носіїв струму  $n(m^{\bullet}, T)$  та кінетичних властивостей кристалів дає можливість з'ясувати їх природу та теоретично розрахувати їхні можливі числові значення. А це дуже важливо в задачах синтезування кристалів із заданими властивостями.

Застосуємо тепер формулу (23) в розрахункових алгоритмах важливих кінетичних властивостей кристалів із законами дисперсії Кейна (19).

До таких кристалів належать кристали селенистого свинцю, бо в них закони дисперсії для електронів і дірок – це закони дисперсії Кейна (19).

Загальний аналіз експериментальних даних кінетичних властивостей для трьох зразків селенистого свинцю з різною концентрацією компенсованих домішків порядку  $10^{18} \text{ см}^{-3}$  показав, що холлівська рухливість у них описується такою формулою:

$$UH_r = \exp(a) \cdot T^b \cdot \text{см}^2 (B \cdot c)^{-1}, \text{ де } a = 20.152, b = -2.343.$$

Проведений аналіз цих експериментальних даних показує, що рухливість Холла монотонно зменшується з підвищенням температури кристалів. Такий характер температурної залежності рухливості, згідно з висновками кінетичної теорії властивостей кристалів, засвідчує велику імовірність розсіювання носіїв струму на дефектах кристалічної ґратки кристалів з показником

розсіювання  $r = 0$ . Цей висновок означає, що в селенистому свинці носії струму розсіюються на акустичних фононах.

Для такого розсіювання, в інтервалі температури від 100 К до 400 К, за формулами (15) і (23) була розрахована холлівська рухливість  $U_{Hr}$  і одержана множина значень  $U_{Hr_i}$  з постійною температурною різницею між собою в 10 К. Ці розрахунки показали, що теоретично розрахована рухливість Холла добре збігається з експериментальними значеннями рухливостей для трьох різних зразків  $U_{h1}, U_{h2}, U_{h3}$  з доволі високими концентраціями компенсованих домішків у кристалах (порядка  $10^{18} \text{ см}^{-3}$ ). Про це свідчать статистичні коефіцієнти Пірсона:

$$\text{corr}(U_{h1}, U_{hr}) = 0.996, \text{corr}(U_{h2}, U_{hr}) = 0.991, \text{corr}(U_{h3}, U_{hr}) = 0.993,$$

які дуже близькі до одиниці. Ці значення коефіцієнтів Пірсона  $\text{corr}(U_{h1}, U_{hr}), \text{corr}(U_{h2}, U_{hr}), \text{corr}(U_{h3}, U_{hr})$  засвідчують високу збіжність розрахункових результатів рухливості  $U_{hr}$  з експериментальними  $U_{hi}$ , де  $i = 1, 2, 3$ .

Проте, незважаючи на високу концентрацію легуючих домішків, у селенистому свинці відсутнє розсіювання носіїв струму на іонізованих домішкових атомах. Цю відсутність кінетична теорія пояснює аномально великою діелектричною постійною кристала  $\epsilon = 250$ .

У досліджуваних кристалах концентрація домішкових носіїв струму майже не залежить від температури, що не зовсім характерно для типових напівпровідникових кристалів. Проте і такі експериментальні факти теж пояснюються великим значенням діелектричної постійної.

1. Буджак Я.С. Исследование явлений переноса в полупроводниках со сложным зонным спектром: Автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. - Л., 1985.
2. Буджак Я.С. Елементи теорії кінетичних властивостей кристалів. - Львів: Львівська політехніка, 1996. - 66 с.
3. Буджак Я.С., Ваків М.М. Елементи статистичної теорії теплових і кінетичних властивостей напівпровідникових кристалів. - Львів: Ліга-Прес, 2010. - 186 с.
4. Пелиа Г., Сеге Г.. Задачи и теоремы из анализа. Ч.1. - М.: Наука, 1978. - 391 с.
5. Аскеров Б.М. Кинетические эффекты в полупроводниках. - Л.: Наука, 1970. - 303 с.
6. Аскеров Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках. - М.: Наука, 1985. - 318 с.