УДК 533.1, 549.9, 53:51

Я.С. Буджак[1], Д.М. Фреїк[2], Л.І. Никируй[2], Л.Й. Межиловська[2]

Елементи теорії кінетичних властивостей кристалів твердотільної електроніки

[1]*Національний університет "Львівська політехніка", вул. С. Бандери, 12, 79005 м.Львів-13*
[2]*Фізико-хімічний інститут при Прикарпатському університеті ім. В.Стефаника*

Розглянуто вплив елементів симетрії закону дисперсії носіїв заряду на кінетичні властивості анізотропних кристалів.

Ключові слова: кінетичні властивості, анізотропія, магнітне поле, симетрія кристалів.

Стаття поступила до редакції 17.05.2001; прийнята до друку 15.06.2001

В роботі [1] були розраховані кінетичні властивості анізотропних кристалів у довільному магнітному полі з індукцією $\vec{B}$. Був вияснений вплив магнітного поля на величину і симетрію цих властивостей та проведені розрахунки у випадку коли вектор магнітної індукції направлений вздовж однієї головної осі "ℓ" енергетичної долини. Головні осі (XYZ) енергетичної долини позначаються трійкою чисел (ijℓ).

При таких умовах спостереження для однодолинної та багатодолинної моделей кристала були розраховані в слабкому і класично сильному магнітному полі компоненти діагональних тензорів питомого опору ρ_{ii}, коефіцієнта Зеєбека α_{ii}, питомої теплопровідності χ_{ii} і коефіцієнта Холла R_{ij} та коефіцієнта Нернста-Еттінгсгаузена N_{ij}.

Ці властивості в слабкому магнітному полі описуються такими загальними формулами:

$$\rho_{ii}(O) = [1/en][1/S_{ii}^{(0)}(O)] = \frac{1}{en\mu_i(0)}, \qquad (1)$$

$$\mu_i(O) = S_{ii}^{(0)}(O);$$

$$R_{ij}(O) = R(O)_{ij} = \frac{1}{zen} F_{Ch}(O), \qquad (2)$$

$$F_{Ch}(B_\ell) = \left(\frac{zA_{ij}^{(0)}(B_\ell)}{(S_{ii}^{(0)}(B_\ell) S_{jj}^{(0)}(B_\ell) + A_{ij}^{(0)}(B_\ell)^2) B_\ell} \right); \qquad (2.a)$$

$$\alpha_{ii}(0) = (k/ze)(S_{ii}^{(1)}(0)/S_{ii}^{(0)}(0)); \qquad (3)$$

$$N_{ij}(0) = \left(\frac{k}{e}\right) F_{Ch}(0) S_{jj}^{(0)}(0) = [S_{jj}^{(1)}(0)/S_{jj}^{(0)}(0) - A_{ij}^{(1)}(0)/A_{ij}^{(0)}(0)]; \qquad (4)$$

$$N_{ji}(0)=\left(\frac{k}{e}\right)F_{Ch}(0)S_{ii}^{(0)}(0)=[S_{ii}^{(1)}(0)/S_{ii}^{(0)}(0)-A_{ij}^{(1)}(0)/A_{ij}^{(0)}(0)]; \quad (5)$$

$$\chi_{ii}(0)=\left(\frac{k}{e}\right)^2\cdot\left(\frac{T}{\rho_{ii}(0)}\right)\cdot\left(\frac{S_{ii}^{(2)}(0)}{S_{ii}^{(0)}(0)}\frac{S_{ii}^{(1)}(0)^2}{S_{ii}^{(0)}(0)^2}\right). \quad (6)$$

В класично сильному полі ці величини мають такі значення:

$$\rho_{ii}(\infty)=[1/en]S_{jj}^{(0)}(\infty)/A_{ji}^{(0)}(\infty)^2=\frac{1}{en\mu_i(\infty)}, \quad (7)$$

$$\rho_{jj}(\infty)=[1/en]S_{ii}^{(0)}(\infty)/A_{ij}^{(0)}(\infty)^2=\frac{1}{en\mu_j(\infty)}, \quad (8)$$

$$\rho_{jj}(\infty)=[1/enS_{\ell\ell}^{(0)}(\infty)]=\frac{1}{en\mu_\ell(\infty)}, \quad (9)$$

$$\mu_i(\infty)=A_{ji}^{(0)}(\infty)^2/S_{jj}^{(0)}(\infty), \quad (10)$$

$$\mu_j(\infty)=A_{ji}^{(0)}(\infty)^2/S_{ii}^{(0)}(\infty), \quad (11)$$

$$\mu_\ell(\infty)=S_{\ell\ell}^{(0)}(\infty); \quad (12)$$

$$R_{ijj}(\infty)=R(\infty)_{ji}=\left(\frac{1}{zen}\right)F_{Ch}(\infty), \quad (13)$$

$$\alpha_{ii}(\infty)=\alpha_{jj}(\infty)=(k/ze)[A_{ij}^{(1)}(\infty)/A_{ij}^{(0)}(\infty)], \quad (14)$$

$$\alpha_{\ell\ell}(\infty)=(k/ze)[S_{\ell\ell}^{(1)}(\infty)/S_{\ell\ell}^{(0)}(\infty)], \quad (14.1)$$

$$N_{ij}(\infty)=\left(\frac{k}{e}\right)F_{Ch}(\infty)\cdot S_{jj}^{(0)}(\infty)=[S_{jj}^{(1)}(\infty)/S_{jj}^{(0)}(\infty)-A_{ij}^{(1)}(\infty)/A_{ij}^{(0)}(\infty)], \quad (15)$$

$$N_{ji}(\infty)=\left(\frac{k}{e}\right)F_{Ch}(\infty)\cdot S_{ii}^{(0)}(\infty)=[S_{ii}^{(1)}(\infty)/S_{ii}^{(0)}(\infty)-A_{ij}^{(1)}(\infty)/A_{ij}^{(0)}(\infty)]; \quad (16)$$

$$\begin{aligned}\chi_{ii}(\infty)=(k/e)^2T\cdot[&\left(S_{ii}^{(2)}(\infty)/S_{ii}^{(0)}(\infty)\right)+\left(A_{ji}^{(1)}(\infty)/A_{ji}^{(0)}(\infty)\right)^2-\\&-2\left(S_{ii}^{(1)}(\infty)/S_{ii}^{(0)}(\infty)\right)\cdot\left(A_{ji}^{(1)}(\infty)/A_{ji}^{(0)}(\infty)\right)]\cdot S_{ii}^{(0)}(\infty)\end{aligned}, \quad (17)$$

$$\chi_{\ell\ell}(\infty)=(k/e)^2\left(T/\rho_{\ell\ell}(\infty)\right)\cdot[\left(S_{\ell\ell}^{(2)}(\infty)/S_{\ell\ell}^{(0)}(\infty)\right)-\left(S_{\ell\ell}^{(1)}(\infty)/S_{\ell\ell}^{(0)}(\infty)\right)]. \quad (18)$$

В цих формулах $S_{ii}^{(b)}(B_\ell)$ та $A_{ij}^{(b)}(B_\ell)$ – компоненти симетричних та антисиметричних тензорів, відповідно, які мають найпростішу будову. Вони мають різні значення для однодолинної та багатодолинної моделей кристалу.

В однодолинному напівпровіднику ці компоненти дорівнюють:

$$S_{ii}^{(b)}(B_\ell)=\left\langle\left\langle\frac{U_i}{\delta(B_\ell)}\right\rangle_S\right\rangle^{(b)}; \qquad S_{jj}^{(b)}(B_\ell)=\left\langle\left\langle\frac{U_j}{\delta(B_\ell)}\right\rangle_S\right\rangle^{(b)};$$

$$S_{\ell\ell}^{(b)}(B_\ell)=\left\langle\left\langle U_\ell\right\rangle_S\right\rangle^{(b)}=S_{\ell\ell}^{(b)}(O); \quad (19)$$

$$A_{ij}^{(b)}(B_\ell) = A_{ji}^{(b)}(B_\ell) = Z\left\langle\left\langle \frac{U_i U_j}{\delta(B_\ell)} \right\rangle_S\right\rangle^{(b)} B_\ell; \tag{20}$$

$$\delta(B_\ell) = 1 + U_i U_j B_\ell^2.$$

В багатодолинній моделі кристала, в якому енергетичні долини розташовані так як в n-германію або n-кремнію, компоненти тензорів (19-20) мають такі значення:

$$S_{ii}^{(b)}(B_\ell) = S_{jj}^{(b)}(B_\ell) = \left\langle\left\langle \frac{U_C}{\delta(B_\ell)} \right\rangle_S\right\rangle^{(b)}, \tag{21}$$

$$S_{\ell\ell}^{(b)}(B_\ell) = \left\langle\left\langle \frac{U_C}{\delta(B_\ell)} \right\rangle_S\right\rangle^{(b)} + \left\langle\left\langle \frac{\nu U_i U_j U_\ell}{\delta(B_\ell)} \right\rangle_S\right\rangle^{(b)} B_\ell, \tag{22}$$

$$A_{ij}^{(b)}(B_\ell) = A_{ji}^{(b)}(B_\ell) = z\left\langle\left\langle \frac{\nu r_C}{\delta(B_\ell)} \right\rangle_S\right\rangle B_\ell, \tag{23}$$

де ν – кількість енергетичних долин у кристалі.

В асимптотичних формулах знаком "∞" позначена магнітна індукція B_ℓ, яка відповідає умові класично сильного магнітного поля $(U_i U_j U_\ell >> 1)$, крім того у всіх формулах для зручності записів введені такі позначення:

$$\langle F\rangle^{(b)} = \int_0^\infty \left(\frac{\varepsilon-\mu}{kT}\right)^{(b)} G(\varepsilon)F(\varepsilon)\left(-\frac{df_0}{d\varepsilon}\right)d\varepsilon \Big/ \int_0^\infty G(\varepsilon)\left(-\frac{df_0}{d\varepsilon}\right)d\varepsilon, \tag{24}$$

$$G(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon g(\varepsilon)d\varepsilon; \qquad g(\varepsilon) = \frac{2}{h^3}\cdot\oint\frac{ds}{|\nabla_P\varepsilon|}; \qquad <F>_S = \oint\frac{Fds}{|\nabla_P\varepsilon|}\Big/\oint\frac{ds}{|\nabla_P\varepsilon|}; \tag{25}$$

$$n = \int_0^\infty G(\varepsilon)\left(-\frac{df_0}{d\varepsilon}\right)d\varepsilon; \qquad f_0 = \frac{1}{\exp[(\varepsilon-\mu)/kT]+1}. \tag{26}$$

Проведені розрахунки показують, що всі розраховані кінетичні параметри кристала залежать від структури енергетичного спектра, від механізмів розсіювання та від величини приведеного хімічного потенціалу.

Вплив закону дисперсії на кінетичні властивості відбувається через посередництво густини енергетичних станів $g(\varepsilon)$ та $G(\varepsilon)$ (див. ф-ли (24), (25)). В цих формулах поверхневий інтеграл береться по енергетичній поверхні, яка задається законом дисперсії

$$\varepsilon_P = \varepsilon(\vec{p}), \tag{27}$$

де $\vec{p}$ – вектор квазіімпульсу носіїв зарядів.

Механізми розсіювання впливають на кінетичні властивості через посередництво функцій розсіювання U_i. Вони мають розмірність рухливості і мають зміст неусереднених рухливостей носіїв зарядів вздовж головних осей енергетичної долини [1].

Розглянемо тепер вплив елементів

симетрії закону дисперсії (17) на кінетичні властивості кристалів. З цією метою розглянемо кристали із законом дисперсії (17), який у сферичній системі координат допускає таке представлення

$$p = \psi(\vartheta,\varphi)P_e(\varepsilon)\,, \qquad (28)$$

де p – модуль вектора квазіімпульсу $\vec{p}$, $\psi(\vartheta,\varphi)$ – функція кутів напрямку вектора $\vec{p}$, а $P_e(\varepsilon)$ – відома функція енергії.

Для закону дисперсії (28) функція розсіювання U_i для актуальних однорідних механізмів розсіювання описується такою загальною формулою [2]

$$U_i = U_i^{(r)}(T,\vartheta,\varphi)n_r(\varepsilon)\,, \qquad (29)$$

$$n_r(\varepsilon) = P_e^{(2r-3)}\left(\frac{d\varepsilon}{dP_e}\right);$$

$$U_i^{(r)}(T,\vartheta,\varphi) = C_i U^{(r)}(T,\vartheta,\varphi). \qquad (29.a)$$

У цих формулах показник розсіювання r і температурна функція $U_i^{(r)}(T,\vartheta,\varphi) = C_i U^{(r)}(T,\vartheta,\varphi)$ залежать від природи кристала та механізмів розсіювання носіїв зарядів у ньому ($C_i = \text{const}$).

При умові (29) всі функції операторів усереднення $\left\langle\langle\ldots\rangle_S\right\rangle$, які входять у формули кінетичних властивостей кристалів, представляються добутком двох функцій F_1, F_2, які відповідно залежать від кутів напрямку імпульсу носія заряду та від його енергії. У зв’язку з цим оператор усереднення $\left\langle\langle F_1(\vartheta,\varphi)\cdot F_2(\varepsilon)\rangle_S\right\rangle^{(b)}$ відповідає такому відношенню

$$\left\langle\langle F_1(\vartheta,\varphi)\cdot F_2(\varepsilon)\rangle_S\right\rangle^{(b)} = \langle F_1(\vartheta,\varphi)\rangle_S \cdot \langle F_2(\varepsilon)\rangle^{(b)}. \qquad (30)$$

Отже при умові (29), а отже і (30), властивості кристалів (1)-(6) у слабкому магнітному полі описуються такими формулами

$$\rho_{ii} = \frac{1}{en\mu_i}; \qquad (31)$$

$$R_{ij} = \frac{1}{zen}\cdot F_{Ch\ell}(r); \qquad (32)$$

$$\alpha_{ii} = \left(\frac{k}{ze}\right)\cdot\left(\frac{\langle xn_r\rangle}{\langle n_r\rangle} - \mu^*\right); \qquad (33)$$

$$N_{ji} = \left(\frac{k}{e}\right)\cdot F_{Ch\ell}(r)\cdot\left(\frac{\langle xn_r\rangle}{\langle n_r\rangle} - \frac{\langle xn_r^2\rangle}{\langle n_r^2\rangle}\right)\cdot\mu_i; \qquad (34)$$

$$N_{ij} = \left(\frac{k}{e}\right)\cdot F_{Ch\ell}(r)\cdot\left(\frac{\langle xn_r\rangle}{\langle n_r\rangle} - \frac{\langle xn_r^2\rangle}{\langle n_r^2\rangle}\right)\cdot\mu_j; \qquad (35)$$

$$\chi_{ii}\left(\frac{k}{e}\right)^2\cdot\left(\frac{T}{\rho_{ii}}\right)\cdot\left(\frac{\langle x^2 n_r\rangle}{\langle n_r\rangle} - \frac{\langle xn_r\rangle^2}{\langle n_r\rangle^2}\right). \qquad (36)$$

У цих формулах рухливість носіїв струму μ_i та фактор Холла $F_{Ch\ell}(r)$ мають різні значення для однодолинного та багатодолинного кристалів. В однодолинному кристалі вони дорівнюють

$$\rho_{ii}(\infty) = \frac{1}{en\mu_i(\infty)}; \qquad \rho_{jj}(\infty) = \frac{1}{en\mu_j(\infty)};$$

$$\rho_{\ell\ell}(\infty) = \frac{1}{en\mu_\ell(\infty)}; \qquad (40)$$

$$R_{ij}(\infty) = R(\infty)_{ji} = \left(\frac{1}{zen}\right)\cdot F_{Ch}(\infty); \qquad (41)$$

$$\alpha_{ii}(\infty) = \alpha_{jj}(\infty) = (k/ze)[\langle x\rangle - \mu^*], \qquad (42)$$

$$\alpha_{\ell\ell}(\infty) = (k/ze)\cdot\left(\frac{\langle xn_r\rangle}{\langle n_r\rangle} - \mu^*\right); \qquad (43)$$

$$N_{ij}(\infty) = \left(\frac{k}{e}\right)F_{Ch}(\infty)\cdot\mu_{jD}(\infty)\cdot\left(\frac{\langle x/n_r\rangle}{\langle 1/n_r\rangle} - \frac{\langle x/n_r^2\rangle}{\langle 1/n_r^2\rangle}\right), \qquad (44)$$

$$N_{ji}(\infty) = \left(\frac{k}{e}\right) F_{Ch}(\infty) \cdot \mu_{iD}(\infty) \cdot \left(\frac{\langle x/n_r \rangle}{\langle 1/n_r \rangle} - \frac{\langle x/n_r^2 \rangle}{\langle 1/n_r^2 \rangle} \right); \tag{45}$$

$$\chi_{ii}(\infty) = \left(\frac{k}{e}\right)^2 enT \cdot \mu_{iD}(\infty) \cdot \left(\frac{\langle x^2/n_r \rangle}{\langle 1/n_r \rangle} - 2 \cdot \frac{\langle x/n_r \rangle}{\langle 1/n_r \rangle} \cdot \langle x \rangle \right), \tag{46}$$

$$\chi_{jj}(\infty) = \left(\frac{k}{e}\right)^2 enT \cdot \mu_{jD}(\infty) \cdot \left(\frac{\langle x^2/n_r \rangle}{\langle 1/n_r \rangle} - 2 \cdot \frac{\langle x/n_r \rangle}{\langle 1/n_r \rangle} \cdot \langle x \rangle \right), \tag{47}$$

$$\chi_{\ell\ell}(\infty) = \left(\frac{k}{e}\right)^2 \left(\frac{T}{\rho_{\ell\ell}(\infty)} \right) \cdot \left(\frac{\langle x^2 n_r \rangle}{\langle n_r \rangle} - 2 \cdot \frac{\langle x n_r \rangle^2}{\langle n_r \rangle^2} \right). \tag{48}$$

У цих формулах величини $\mu_i(\infty)$, $\mu_{iD}(\infty)$ та $F_{Ch}(\infty)$ мають різні значення в однодолинних та багатодолинних кристалах. В однодолинних кристалах вони дорівнюють:

$$\mu_i(\infty) = 1/\left\langle 1/U_i^{(r)} \right\rangle_S \langle 1/n_r \rangle,$$

$$\mu_j(\infty) = 1/\left\langle 1/U_j^{(r)} \right\rangle_S \langle 1/n_r \rangle,$$

$$\mu_\ell(\infty) = \left\langle U_\ell^{(r)} \right\rangle_S \langle n_r \rangle; \tag{49}$$

$$\mu_{iD}(\infty) = \left\langle 1/U_j^{(r)} \right\rangle_S \langle 1/n_r \rangle / B_\ell^2,$$

$$\mu_{jD}(\infty) = \left\langle 1/U_i^{(r)} \right\rangle_S \langle 1/n_r \rangle / B_\ell^2;$$

$$F_{Ch}(\infty) = 1.$$

У багатодолинних кристалах ці величини мають такі значення:

$$\mu_i(\infty) = \mu_j(\infty) = \frac{\nu \left\langle 1 + U_\ell^{(r)}/U_j^{(r)} + U_\ell^{(r)}/U_i^{(r)} \right\rangle_S^2}{3 \cdot \left\langle 1/U_i^{(r)} + 1/U_j^{(r)} + U_\ell^{(r)}/U_i^{(r)} U_j^{(r)} \right\rangle_S \langle 1/n_r \rangle}, \tag{50}$$

$$\mu_\ell(\infty) = \left\langle U_\ell^{(r)} \right\rangle_S \langle n_r \rangle,$$

$$\mu_{iD}(\infty) = \mu_{iD}(\infty) = \nu \left\langle 1/U_i^{(r)} + 1/U_j^{(r)} + U_\ell^{(r)}/U_i^{(r)} U_j^{(r)} \right\rangle_S \langle 1/n_r \rangle / B_\ell^2;$$

$$F_{Ch}(\infty) = \frac{3}{\nu \left\langle 1 + U_\ell^{(r)}/U_i^{(r)} + U_\ell^{(r)}/U_j^{(r)} \right\rangle_S}. \tag{51}$$

У приведених формулах використані позначення $x = kT$, μ^* – приведений хімічний потенціал, а для оператора усереднення $\langle ... \rangle^{(0)}$ використано тотожне позначення $\langle ... \rangle^{(0)} = \langle ... \rangle$.

Проведені розрахунки показують, що в однодолинних кристалах всі властивості (31)-(36) у відсутності магнітного поля мають анізотропний характер, а їх анізотропія повністю визначається симетрією закону дисперсії (28) та характером анізотропії функції розсіювання U_i (29), яка має зміст неусередненої рухливості носія заряду вздовж головної осі "i" енергетичної долини.

У багатодолинних кубічних кристалах ці властивості є скалярними величинами.

Крім того, загальний аналіз формул (31)-(36) показує, що в однодолинних кристалах відсутні повздовжні гальваномагнітні та термомагнітні ефекти. Відсутність цих ефектів має просте фізичне пояснення, але теоретично це пов'язано з тим, що компоненти симетричних тензорів $S_{\ell\ell}^{(b)}$ не залежать від магнітного поля. У багатодолинних кристалах ця залежність існує (22), тому в таких кристалах і спостерігаються відповідні повздовжні ефекти.

У класично сильному магнітному полі властивості (31)-(36) у всіх кристалах анізотропні, поперечний магнітоопір, коефіцієнт ефекту Холла та коефіцієнт ефекту Зеєбека досягають свого стаціонарного значення, а електронна теплопровідність та коефіцієнт поперечного термомагнітного ефекту Нернста-Еттінгсгаузена обернено пропорційні квадрату магнітної індукції. Тобто в сильних магнітних полях відбувається відомий ефект виморожения електронної теплопровідності та сильне зменшення ефекту Нернста-Еттінгсгаузена. При цьому коефіцієнт Зеєбека не залежить від механізмів розсіювання, а залежить лише від структури енергетичного спектра. Таку саму незалежність від механізмів розсіювання має і коефіцієнт Холла для однодолинної моделі кристала.

Із приведених розрахунків видно, що в однодолинних кристалах існує лише поперечний магнітоопір, який, як можна довести за допомогою т. з. Нерівності Шварца, завжди позитивний.

У багатодолинних кристалах крім поперечного магнітоопору існує ще і поздовжній, який при умові

$$\mu_\ell(0) = \frac{\nu\left\langle U_i^{(r)} + U_j^{(r)} + U_\ell^{(r)} \right\rangle_S \langle n_r \rangle}{3} < \nu\left\langle U_\ell^{(r)} \right\rangle_S \langle n_r \rangle = \mu_\ell(\infty)$$

$$2\cdot\left\langle U_\ell^{(r)} \right\rangle_S > \left\langle U_i^{(r)} + U_j^{(r)} \right\rangle_S$$

може бути негативний.

Доведення того, що в багатодолинних кристалах поперечний магнітоопір завжди позитивний, як це можна зробити для однодолинних кристалів досить проблематичне, хоча багато експериментальних досліджень немов би підтверджують такий висновок. Його легко можна довести для кристалів з ізотропними або сфероїдальними енергетичними долинами, у яких компоненти $U_i^{(r)}$ можна вважати постійними.

Для доведення розрахунків кінетичних властивостей кристала до числа потрібно знати закон дисперсії та компоненти функцій розсіювання U_i як явні функції вектора $\vec{p}$. Такі розрахунки будуть виконані уже в іншій роботі.

[1] Я.С.Буджак, Д.М.Фреїк, Л.І.Никируй, Л.Й.Межиловська // Елементи теорії термодинамічних та кінетичних властивостей кристалів. *Фізика і хімія твердого тіла,* **1**(2), сс.159-166 (2000).

[2] Я.С. Буджак. Кінетичні властивості анізотропних кристалів. *Деп. в ДНТБ України* 27.04.2000, №**86**-Ук (2000).

[3] Я.С. Буджак, Д.М.Фреїк, О.З. Готра, Л.І. Никируй, Л.Й. Межиловська // До теорії кінетичних явищ у напівпровідникових кристалах. *Фізика і хімія твердого тіла.* **2**(1), сс.77-85 (2001).

J.S. Budjak[1], D.M. Freik[2], L.I. Nykyruy[2], L.Y. Mezhylovska[2]

Elements of the Theory to Crystals Kinetic Properties for the Solid State

[1]State University "Lvivska Polytehnika", 12, Bandera Str., 79005, Lviv
[2]Physics-Chemical Institute at the Vasyl Stefanyk Precarpathian University, 57, Shevchenko Str., 76000, Ivano-Frankivsk

Influence of symmetry elements of variance low on kinetic properties anizotropic crystals are shown.