

Я.С. Буджак

Елементи статистичної теорії кінетичних властивостей тонких плівок

Національний університет "Львівська політехніка" 79013 м. Львів-13, вул. С.Бандери 12

В роботі висвітлюються елементи статистичної теорії властивостей плівкових кристалів, яка є альтернативною до кінетичної теорії, яка ґрунтується на кінетичному рівнянні Больцмана.

Ключові слова: статистична сума, термодинамічні потенціали, канонічний розподіл Гіббса.

Стаття поступила до редакції 19.05.2005; прийнята до друку 24.05.2005.

Вступ

Монокристалічна провідна плівка – це в цілому велика термодинамічна система, яка складається з величезної кількості атомарно-молекулярних частинок двох сортів.

Один сорт частинок – це структурні частинки, які знаходяться у вузлах кристалічної ґратки, біля яких вони здійснюють хаотичні коливання при будь-якій температурі. Ця сукупність частинок відноситься до так званих квантових ансамблів з постійною кількістю частинок. Тому статистичні властивості цієї сукупності частинок описується канонічним розподілом Гіббса.

Другий сорт частинок – це частинки газу носіїв зарядів в провідних кристалах. Це – електрони, або дірки, які утворюють електропровідність кристалів. В статистичній фізиці ці частинки відносять до великих квантових ансамблів із змінним числом частинок. Ця сукупність частинок характеризується хімічним потенціалом μ , а статистичні властивості такої сукупності описуються великим канонічним розподілом Гіббса.

Багаточастинкові системи характеризуються низкою термодинамічних потенціалів, ентропією S та теплоємністю C .

Розраховані для ансамблів з постійною кількістю частинок за допомогою канонічного розподілу Гіббса термодинамічні потенціали, ентропія і теплоємність мають такі значення:

$$F = -kT \ln Z \quad (1)$$

$$U = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_V = kT^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right) \quad (2)$$

$$G = kT \left[\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln V} \right)_T - \ln Z \right] \quad (3)$$

$$H = kT \left[\left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln V} \right)_T + \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln V} \right)_V \right] \quad (4)$$

$$S = k \left[\ln Z + T \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln T} \right)_V \right] \quad (5)$$

$$C_V = \left(\frac{dU}{dT} \right)_V \quad (6)$$

В цих формулах k – постійна Больцмана, T – температура системи, Z – статистична сума системи.

Статистична сума квантових ансамблів з постійним числом частинок описується такою загальною формулою [1]:

$$Z = \sum_i \exp \left(-\frac{\varepsilon_i}{kT} \right) \quad (7)$$

де ε_i – енергія індивідуальної системи ансамблю, який знаходиться в енергетичному стані i , а сумування в цій формулі необхідно проводити за всіма можливими квантовими станами всіх частинок.

Для квантових ансамблів із змінною кількістю частинок в стані термодинамічної рівноваги статистична сума має таке значення [1]:

$$Z_e = \prod_{\vec{k}} \left[1 + \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon(\vec{k})}{kT} \right) \right]^2 \quad (8)$$

В цій формулі \vec{k} – хвильовий вектор носія заряду, який відіграє роль квантового числа, $\varepsilon = \varepsilon(\vec{k})$ – закон дисперсії носіїв зарядів, а μ – їх хімічний потенціал.

Ансамбль частинок, який характеризується статистичною сумою (8) володіє великим термодинамічним потенціалом Гіббса Ω_e , який має таке значення:

$$\Omega_e = -kT \ln Z_e = -2kT \sum_{\vec{k}} \ln \left[1 + \exp \left(\frac{\mu - \varepsilon(\vec{k})}{kT} \right) \right] \quad (9)$$

Розраховані за допомогою великого канонічного розподілу Гіббса для цього ансамблю кількість частинок в ньому та величини (1-6) описуються такими загальними формулами :

$$N_e = - \left(\frac{\partial \Omega_e}{\partial \mu} \right)_T \quad (10)$$

$$F_e = - \left(\frac{\partial \Omega_e}{\partial \mu} \right)_T \mu + \Omega_e \quad (11)$$

$$U_e = - \left(\frac{\partial \Omega_e}{\partial \mu} \right)_T \mu - \left(\frac{\partial \Omega_e}{\partial T} \right)_\mu T + \Omega_e \quad (12)$$

$$H_e = - \left(\frac{\partial \Omega_e}{\partial \mu} \right)_T \mu - \left(\frac{\partial \Omega_e}{\partial T} \right)_\mu T \quad (13)$$

$$S_e = - \left(\frac{\partial \Omega_e}{\partial T} \right)_\mu \quad (14)$$

$$C_{V_e} = \left(\frac{dU}{dT} \right)_V \quad (15)$$

Кристал, як єдина система, складається із двох різних ансамблів частинок. Тому його відповідні загальні теплові властивості адитивно складаються із відповідних властивостей (1-6) та (11-15).

Якщо кристал за допомогою електричного поля з напруженістю \vec{E} і градієнта температури $\nabla_{\vec{r}} T$ вивести із стану термодинамічної рівноваги, то газ носіїв струму стає нерівноважним, а його частинки утворюють нерівноважний великий ансамбль із змінною кількістю частинок. Статистична сума для цього ансамблю частинок має таке значення :

$$Z_e = \prod_{\vec{k}} \left[1 + \exp \left(\frac{\mu + \Delta\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k})}{kT} \right) \right]^2 \quad (16)$$

В цій формулі $\Delta\varepsilon(\vec{k})$ – зміна вільної енергії однієї частинки під дією тих збурень, які виводять кристал із стану термодинамічної рівноваги, а всі інші позначення вже описані у формулі (8). Значення $\Delta\varepsilon(\vec{k})$ розраховане в роботах [2-4].

У нерівноважному газі носіїв зарядів відбуваються процеси перенесення електрики і теплоти, які описуються першим та другим законами нерівноважної термодинаміки

$$\frac{dU_e}{dt} = \vec{j} \cdot \vec{E} - \text{div} \vec{q} \quad (17)$$

$$\frac{dS_e}{dt} = \frac{1}{T} \left(\vec{j} \cdot \vec{E} - \frac{\vec{q} \cdot \nabla_{\vec{r}} T}{T} \right) \quad (18)$$

де \vec{j} і \vec{q} – вектори густини струму та теплового потоку.

Якщо для розрахунку похідної $\frac{dS_e}{dt}$ використати значення ентропії за формулою (14), в якій використати статистичну суму (16), то в результаті отримаємо

$$\frac{dS_e}{dt} = \frac{1}{T} \left(\frac{2ze}{\hbar} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) \cdot \vec{E} - \frac{2}{\hbar} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} (\varepsilon(\vec{k}) - \mu) \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) \cdot \frac{\nabla_{\vec{r}} T}{T} \right) \quad (19)$$

В цьому рівнянні ($z = \pm$) - знак носія заряду, e - величина заряду електрона, \hbar – постійна Планка, а функція $f_{\vec{k}}$ – це нерівноважна функція розподілу для нерівноважних носіїв зарядів. Вона має таке значення:

$$f_{\vec{k}} = \frac{1}{\exp \left(\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \Delta\varepsilon(\vec{k}) - \mu}{kT} \right) + 1} \quad (20)$$

В стані термодинамічної рівноваги величина $\Delta\varepsilon(\vec{k}) = 0$ [3], тому в цьому випадку функція розподілу (20) дорівнює функції розподілу Фермі-Дірака

$$f_0 = f_0(\vec{k}) = \frac{1}{\exp \left(\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu}{kT} \right) + 1} \quad (20 \text{ a})$$

Порівняємо тепер рівняння (19) з рівнянням другого закону термодинаміки (18), тоді приходимо до висновку, що вектори \vec{j} і \vec{q} дорівнюють

$$\vec{j} = \frac{2ze}{\hbar} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) \quad (21)$$

$$\vec{q} = \frac{2}{\hbar} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} (\varepsilon(\vec{k}) - \mu) \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) \quad (22)$$

Ці рівняння відповідно називаються узагальненими рівняннями електропровідності та теплопровідності.

В омичній області провідності кристала відхилення його енергетичного стану від стану термодинамічної рівноваги невелике, тобто збурення $\Delta\varepsilon(\vec{k})$, яке входить у всі статистичні розрахункові формули невелике.

В зв'язку з цим розкладемо функцію розподілу (20) в ряд Тейлора по збуренню $\Delta\varepsilon(\vec{k})$, яке, як показано в роботі [3], є непарною функцією вектора \vec{k} , і в розрахунках використаємо лінійне наближення. Тоді маємо

$$f_{\vec{k}} = f_0 + \Delta\varepsilon(\vec{k}) \left(- \frac{df_0}{d\varepsilon} \right) \quad (23)$$

Якщо врахувати тепер те, що $\Delta\varepsilon(\vec{k})$ - непарна функція вектора \vec{k} , то в наближенні (23) вектор густини струму \vec{j} (21) та вектор густини теплового потоку \vec{q} (22) мають такі значення :

$$\vec{j} = \frac{2ze}{\hbar} \sum_{\vec{k}} \Delta\varepsilon(\vec{k}) \left(- \frac{df_0}{d\varepsilon} \right) \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) \quad (24)$$

$$\vec{q} = \frac{2}{\hbar} \sum_{\vec{k}} (\varepsilon(\vec{k}) - \mu) \Delta\varepsilon(\vec{k}) \left(- \frac{df_0}{d\varepsilon} \right) \nabla_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k}) \quad (25)$$

Дальші розрахунки в цих рівняннях приводять їх до такого вигляду:

$$\vec{j} = \text{en} \left(S_{ij}^{(0)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(0)} \right) \vec{E} - \text{en} \left(\frac{k}{ze} \right) \left(S_{ij}^{(1)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(1)}(\vec{B}) \right) \nabla_{\vec{r}} T \quad (26)$$

$$\vec{q} = \text{en} \left(\frac{k}{ze} \right) T \left(S_{ij}^{(0)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(0)} \right) \vec{E} - \text{en} \left(\frac{k}{ze} \right)^2 T \left(S_{ij}^{(1)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(1)}(\vec{B}) \right) \nabla_{\vec{r}} T \quad (27)$$

$$n = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} f_0(\vec{k}) \quad (28)$$

В цих формулах n – концентрація носіїв зарядів, \vec{B} – вектор магнітної індукції, V – об'єм кристала, а $S_{ij}^{(1)}(\vec{B})$ та $A_{ij}^{(1)}(\vec{B})$ – це т.зв. компоненти симетричних та антисиметричних тензорів кінетичних коефіцієнтів, які описують кінетичні властивості кристалів.

Тензори кінетичних коефіцієнтів залежать від енергетичної моделі кристала, від структури закону дисперсії та від механізмів розсіювання носіїв зарядів на дефектах кристалічної ґратки.

Для однодолинної моделі кристала компоненти цих тензорів описуються такими загальними формулами:

$$S_{ij}^{(s)}(\vec{B}) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu}{kT} \right)^1 \left[\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i} \cdot k_i \cdot U_{ij}^{(s)}(\vec{B}) \right] \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} f_0(\vec{k}) \quad (29)$$

$$A_{ij}^{(a)}(\vec{B}) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu}{kT} \right)^1 \left[\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_i} \cdot k_i \cdot U_{ij}^{(a)}(\vec{B}) \right] \left(- \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} f_0(\vec{k}) \quad (30)$$

В цих формулах $U_{ij}^{(s)}(\vec{B})$ та $U_{ij}^{(a)}(\vec{B})$ – це відомі розмірні анізотропні функції розсіювання [5-8]. Вони мають розмірність рухливості і описують вплив механізмів розсіювання носіїв зарядів на кінетичні властивості кристалів.

Рівняння (26) і (27) – це загальновідомі рівняння термодинаміки незворотних процесів. Вони описують відгук провідного середовища на дію електричного поля, градієнта температури, магнітного поля. Тензори кінетичних коефіцієнтів, які входять в ці рівняння, пов'язані з тензорами кінетичних властивостей кристалів такими загальними відношеннями:

$$\left(\rho_{ij}(\vec{B}) \right) + \left(R_{ij}(\vec{B}) \delta_{ij} B_1 \right) = \frac{1}{\text{en}} \left(S_{ij}^{(0)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(0)}(\vec{B}) \right)^{-1} \quad (31)$$

$$\left(\alpha_{ij}(\vec{B}) \right) + \left(N_{ij}(\vec{B}) \delta_{ij} B_1 \right) = \left(\frac{k}{ze} \right) \left(S_{ij}^{(0)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(0)}(\vec{B}) \right)^{-1} \times \left(S_{ij}^{(1)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(1)}(\vec{B}) \right) \quad (32)$$

$$\left(\pi_{ij}(\vec{B}) \right) + \left(E_{ij}(\vec{B}) \delta_{ij} B_1 \right) = \left(\frac{k}{ze} \right) T \left(S_{ij}^{(1)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(1)}(\vec{B}) \right) \times \left(S_{ij}^{(0)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(0)}(\vec{B}) \right)^{-1} \quad (33)$$

$$\left(\chi_{ij}(\vec{B}) \right) + \left(P_{ij}(\vec{B}) \delta_{ij} B_1 \right) = \text{en} \left(\frac{k}{ze} \right)^2 T \times \left[\left(S_{ij}^{(2)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(2)}(\vec{B}) \right) - \left(S_{ij}^{(1)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(1)}(\vec{B}) \right) \times \left(S_{ij}^{(0)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(0)}(\vec{B}) \right)^{-1} \left(S_{ij}^{(1)}(\vec{B}) + A_{ij}^{(1)}(\vec{B}) \right) \right] \quad (34)$$

В цих відношеннях $\left(\rho_{ij}(\vec{B}) \right)$, $\left(\alpha_{ij}(\vec{B}) \right)$, $\left(\pi_{ij}(\vec{B}) \right)$, $\left(\chi_{ij}(\vec{B}) \right)$ – це відповідно тензори питомого опору, коефіцієнта ефекту Зеебека, ефекту Пельтье та питомої електронної теплопровідності кристала; а $R_{ij}(\vec{B})$, $N_{ij}(\vec{B})$, $E_{ij}(\vec{B})$, $P_{ij}(\vec{B})$ – це коефіцієнти поперечних ефектів Холла, Нернста-Еттінгсгаузена, Еттінгсгаузена та Ріді-Ледюка, δ_{ij} – одиничний антисиметричний тензор Леві-Чівіта (тут за суміжними індексами 1, які повторюються, ведеться сумування).

Тензори кінетичних коефіцієнтів, які входять в узагальнені рівняння електропровідності (26) та теплопровідності (27), описують кінетичні властивості кристалів та ефекти, в яких ці властивості проявляються. Всі ці ефекти мають широке застосування в сучасній твердотілій електроніці.

Можна показати, що для масивних однодолинних кристалів компоненти цих тензорів (29) і (30) можна привести до такого вигляду [7]:

$$S_{ij}^{(b)}(\vec{B}) = \left\langle \left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right)^b \left\langle \frac{U_i \delta_{ij} + U_1 U_2 U_3 B_1 B_j}{1 + B_1^2 U_2 U_3 + B_2^2 U_1 U_3 + B_3^2 U_1 U_2} \right\rangle_s \right\rangle \quad (35)$$

$$A_{ij}^{(b)}(\vec{B}) = \left\langle \left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right)^b \left\langle \frac{z U_i U_j \delta_{ij} B_1}{1 + B_1^2 U_2 U_3 + B_2^2 U_1 U_3 + B_3^2 U_1 U_2} \right\rangle_s \right\rangle \quad (36)$$

В цих формулах для зручності записів введені такі позначення для статистичних усереднень:

$$\langle F \rangle = \frac{\int_0^{\infty} F(\varepsilon) G(\varepsilon) \left(- \frac{df_0}{d\varepsilon} \right) d\varepsilon}{\int_0^{\infty} G(\varepsilon) \left(- \frac{df_0}{d\varepsilon} \right) d\varepsilon} \quad (37)$$

$$\langle F \rangle_s = \frac{\oint \frac{F(\vec{p})}{|\nabla_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p})|} dS}{\oint \frac{dS}{|\nabla_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p})|}} \quad (38)$$

$$G(\varepsilon) = \int_0^{\varepsilon} \left(\frac{2}{\hbar} \oint \frac{dS}{|\nabla_{\vec{p}} \varepsilon(\vec{p})|} \right) d\varepsilon \quad (39)$$

Поверхневі інтеграли у формулах (38) та (39) беруться по поверхні постійної енергії, яка задається законом дисперсії, який відповідає вимогам симетрії кристалічної ґратки

$$\varepsilon = \varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{p}); \vec{p} = \hbar \vec{k} \quad (40)$$

Анізотропні функції розсіювання $U_i(\vec{p})$ – це компоненти діагонального тензора мікроскопічної (неусередненої) рухливості. Вони описуються такою формулою:

$$U_i = \frac{\epsilon_i}{p_i} \frac{\partial \epsilon}{\partial p_i}, \quad \frac{1}{\tau_i} = \int \frac{(p_i - p_i')}{p_i} W(\bar{p}, \bar{p}') d\bar{p}' \quad (41)$$

де $W(\bar{p}, \bar{p}')$ – квантово-механічна імовірність розсіювання носія заряду на дефектах кристалічної ґратки.

Природа кінетичних властивостей масивних кристалів із законом дисперсії (40) та тензорами (35) і (36) досить детально вивчена в роботах [8-11].

В тонких монокристалічних плівках товщиною d закон дисперсії сильно відрізняється від закону дисперсії (40), а його наближене значення можна описати такою формулою [12]:

$$\epsilon = \epsilon(l, k_x, k_y) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{d} \right)^2 l^2 + \epsilon_1(k_x, k_y) \quad (42)$$

де m - ефективна маса носіїв струму, $\epsilon_1 = \epsilon_1(k_x, k_y)$ – двовірно-періодична функція вектора $\vec{k}_{\parallel} = \vec{i}k_x + \vec{j}k_y$ в площині плівки, а $l=1, 2, 3, \dots$ – квантове число просторового квантування.

Цей закон дисперсії не відповідає властивостям симетрії закону дисперсії (40) масивного кристала. Він не є трьох мірно-періодичною функцією хвильового вектора \vec{k} . В зв'язку з цим у розрахункових формулах (29), (30) замість сумування за вектором $\vec{k} \rightarrow \sum_{k_x, k_y, k_z} \phi(\vec{k})$ необхідно проводити сумування за розмірним квантовим числом l і вектором \vec{k}_{\parallel} і обрахувати такі суми $\sum_{l, k_x, k_y} \phi(l, k_x, k_y)$. Такі розрахунки показують, що

на властивості тонких плівок діє лише складова магнітної індукції $B_z = B_3$ нормальна до поверхні плівки. Це пов'язано з тим, що складова квантової швидкості в цьому напрямку тотожно дорівнює нулю, а отже і середня мікроскопічна рухливість в цьому напрямку дорівнює нулю.

В зв'язку з цим тензори кінетичних коефіцієнтів (35), (36) для тонких плівок набувають такого вигляду:

$$S_{ij}^{(b)}(B_3) = \frac{2}{ndh^2} \sum_1 \int_{\epsilon_0 l^2}^{\infty} \left(\int_0^{2\pi} \frac{1}{2} P^2((\epsilon - \epsilon_0 l^2), \varphi) d\varphi \right) \times \left(\frac{\epsilon - \mu}{kT} \right)^b \left\langle \frac{U_i}{1 + B_3^2 U_1 U_2} \right\rangle_{\varphi} \left(-\frac{df_0}{d\epsilon} \right) d\epsilon \cdot \delta_{ij} \quad (43)$$

$$A_{ij}^{(b)}(B_3) = \frac{2}{ndh^2} \sum_1 \int_{\epsilon_0 l^2}^{\infty} \left(\int_0^{2\pi} \frac{1}{2} P^2((\epsilon - \epsilon_0 l^2), \varphi) d\varphi \right) \times \left(\frac{\epsilon - \mu}{kT} \right)^b \left\langle \frac{U_i U_j}{1 + B_3^2 U_1 U_2} \right\rangle_{\varphi} \left(-\frac{df_0}{d\epsilon} \right) d\epsilon \cdot \delta_{3ij} B_3 \quad (44)$$

$$n = \frac{2}{dh^2} \sum_1 \int_{\epsilon_0 l^2}^{\infty} \left(\int_0^{2\pi} P((\epsilon - \epsilon_0 l^2), \varphi) \frac{dP((\epsilon - \epsilon_0 l^2), \varphi)}{d\epsilon} d\varphi \right) f_0(\epsilon) d\epsilon \quad (45)$$

В цих формулах $\epsilon_0 = \hbar^2/8md^2$, $P((\epsilon - \epsilon_0 l^2), \varphi) = P(\epsilon, l, \varphi)$ – це модуль переходу в законі дисперсії (42) від декартової системи

координат (p_x, p_y) до полярної $(P \sin \varphi, P \cos \varphi)$, а кутовими дужками $\langle \dots \rangle_{\varphi}$ позначене таке усереднення:

$$\langle F \rangle_{\varphi} = \frac{\int_0^{2\pi} F(\varphi) P(\epsilon, \varphi) \frac{\partial P(\epsilon, \varphi)}{\partial \epsilon} d\varphi}{\int_0^{2\pi} P(\epsilon, \varphi) \frac{\partial P(\epsilon, \varphi)}{\partial \epsilon} d\varphi} \quad (46)$$

Тензори (43) і (44) за допомогою загальних відношень зв'язку тензорів кінетичних коефіцієнтів з кінетичними властивостями кристалів (32)-(35) дають можливість розрахувати всі кінетичні властивості тонких кристалічних плівок. Такі загальні розрахунки кінетичних властивостей масивних кристалів описані в роботах [8-11].

Внаслідок просторового квантування закону дисперсії (42) всі ці властивості мають явну залежність від товщини плівки d . Це сильно ускладнило всі розрахунки в порівнянні з аналогічними розрахунками для масивних кристалів [8-11].

Розглянемо тепер ізотропну монокристалічну плівку з ізотропним параболічним законом дисперсії носіїв зарядів, ефективна маса яких дорівнює масі вільного електрона m . В таких кристалах $U_i = U_j = U(\epsilon)$, а модуль переходу $P((\epsilon - \epsilon_0 l^2), \varphi) = \sqrt{2m(\epsilon - \epsilon_0 l^2)}$. Для зручності розрахунків деяких властивостей такого кристала помістимо його в класично сильне неквантуєче магнітне поле. В такому полі виконується умова $(UB_3) \gg 1$.

При таких умовах спостереження питомий опір ρ , коефіцієнт ефекту Холла R та коефіцієнт ефекту Зеебека α для кристала описуються такими формулами:

$$\rho = \frac{1}{en} \left(\frac{\sum_{l=1}^{\infty} \int_{\epsilon_0 l^2}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_0 l^2) \left(\frac{1}{U(\epsilon)} \right) \left(-\frac{df_0}{d\epsilon} \right) d\epsilon}{\sum_{l=1}^{\infty} \int_{\epsilon_0 l^2}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_0 l^2) \left(-\frac{df_0}{d\epsilon} \right) d\epsilon} \right) \quad (47)$$

$$R = \frac{1}{zen} \quad (48)$$

$$\alpha = \frac{k}{ze} \left(\frac{\sum_{l=1}^{\infty} \int_{\epsilon_0 l^2}^{\infty} \left(\frac{\epsilon}{kT} \right) (\epsilon - \epsilon_0 l^2) \left(-\frac{df_0}{d\epsilon} \right) d\epsilon}{\sum_{l=1}^{\infty} \int_{\epsilon_0 l^2}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_0 l^2) \left(-\frac{df_0}{d\epsilon} \right) d\epsilon} - \mu^* \right) \quad (49)$$

$$n = \frac{x_0}{2d^3} \sum_{l=1}^{\infty} \ln \left(\exp \left(\mu^* - \frac{\pi}{x_0} l^2 \right) + 1 \right); \quad (50)$$

$$x_0 = \frac{8\pi m k T d^2}{h^2}; \quad \epsilon_0 = \frac{\pi k T}{x_0}$$

Розрахуємо тепер за формулами (48-50) коефіцієнт Холла з сильно виродженим електронним газом ($\mu^* = 10$) та коефіцієнт ефекту Зеебека для

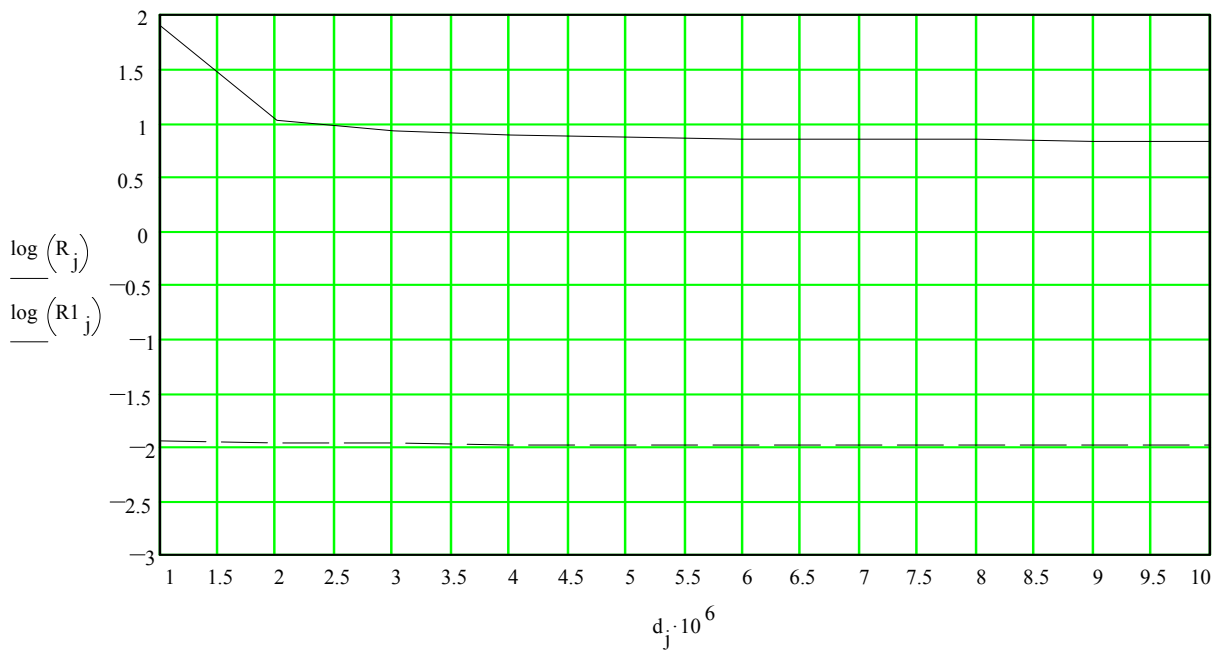


Рис. 1. Залежність коефіцієнтів Холла R і R_1 сильно виродженого електронного газу ($\mu=10$) від товщини кристалічної плівки та температури $T = 4,2$ К для R $T_1 = 300$ К для R_1

кристала з невиродженим газом ($\mu^* = -4$) при криогенній температурі 4,2 К та температурі 300 К. Результати таких розрахунків приведені на рисунку 1. Коефіцієнт Зеебека α при описаних умовах спостереження вже не корелює з товщиною плівки і має значення, як для масивного кристала

температурах і товщині плівок $d \approx (10^{-6} \div 10^{-5})$ см. З підвищенням температури це квантування зникає.

Крім того, розрахунки показали, що на кінетичні властивості плівкових кристалів діє лише нормальна до площі плівки складова вектора магнітної індукції і вона не змінює симетрію тензорів кінетичних властивостей кристалів. Така зміна спостерігається в масивних кристалах.

Висновки

Розрахунки виконані в даній роботі наглядно показали, що просторове квантування в тонких плівкових кристалах спостерігається при криогенних

Буджак Я.С. – доктор фізико-математичних наук, професор.

- [1] Р. Кубо. *Статистическая механика*. Мир., М. (1967).
- [2] Я.С. Буджак. *Исследование явлений переноса в полупроводниках со сложным зонным спектром*. Автореф. диссерт. докт. физ.-мат. наук, Л. (1985).
- [3] Budjak J.S. New approach in the Kinetic Theory of Crystal Properties. *Statistical Physics and Phase Transitions // Phys. in Ukraine. Inter. Conference. Kiev (1993)*.
- [4] Я.С. Буджак. Термодинамические методы в исследовании кинетических свойств полупроводников. // *Термодинамика и материаловедение полупроводников. Материалы IV Всесоюзн. конф.* Ч.І. М., сс. 56-67, (1989).
- [5] Буджак Я.С. Про природу кінетичних властивостей кристалів // *Вісн. Національного ун-ту "Львівська політехніка"*, **362**, сс.70-73, (1999).
- [6] Я.С. Буджак. Елементи теорії термодинамічних та кінетичних властивостей кристалів. // Міжнародна школа-конференція з актуальних питань фізики напівпровідників. *Матеріали конференції*, Дрогобич, Україна, сс.242-251 (1999).
- [7] Я.С. Буджак, О.В. Стахів, С.П. Новосядлий. Термодинамічні потенціали та кінетичні властивості актуальних кристалів твердотілої електроніки // *Вісник ДУ "Львівська політехніка"*, **325**, сс.28-37, (1998).
- [8] Я.С. Буджак. Нова концепція в теорії кінетичних властивостей кристалів // *Вісник ДУ "Львівська політехніка"*, **297**, сс.25-33, (1995).

- [9] Я.С. Буджак, Д.М. Фреїк, та ін. Елементи теорії термодинамічних та кінетичних властивостей кристалів // *Фізика і хімія твердого тіла*, **1**(2), сс. 159-166 (2000).
- [10] Я.С. Буджак, Д.М. Фреїк, та ін. До теорії кінетичних явищ у напівпровідникових кристалах // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2**(1), сс. 77-85 (2001).
- [11] Я.С. Буджак, Д.М. Фреїк, та ін. Елементи теорії кінетичних властивостей кристалів твердотілої електроніки // *Фізика і хімія твердого тіла*, **2**(3), сс. 361-367 (2001).
- [12] Б.М. Аскеров. *Электронные явления переноса в полупроводниках*. Наука, М. (1985).

Ya.S. Budzhak

The Elements of the Statistical Theory of Thin Films Kinetic Properties

National University "Lviv Polytechnics", 12, Bandery Str., , Lviv-13, 79013, Ukraine

There are the elements of the statistical theory of film-like crystals kinetic properties, as alternative to the kinetic theory, bases on the Boltzman kinetic equation.