

Д.М. Фреїк, Л.І. Никируй, О.І. Ільків, О.М. Возняк

## Метод часу релаксації та варіаційний підхід у аналізі явищ переносу у напівпровідниках $A^{IV}B^{VI}$

Фізико-технічний факультет Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника,  
вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна, E-mail: [intelect@pu.if.ua](mailto:intelect@pu.if.ua)

Виконано порівняльний аналіз різних теоретичних наближень, які використовують для розв'язання рівняння Больцмана при дослідженні механізмів розсіювання носіїв заряду у напівпровідниках  $A^{IV}B^{VI}$ : метод часу релаксації та варіаційний підхід. Визначено концентраційні та температурні межі домінування окремих механізмів розсіювання носіїв заряду. Вказана переваги кожного із розглядуваних підходів.

**Ключові слова:** напівпровідники  $A^{IV}B^{VI}$ , механізми розсіювання, рухливості носіїв заряду, метод часу релаксації, варіаційний підхід.

Стаття постуила до редакції 12.01.2007; прийнята до друку 15.06.2007.

одержання результату з достатньою точністю.

### Вступ

Одним із зручних методів розв'язання рівняння Больцмана є застосування варіаційного принципу [1]. Найбільш складним при цьому є правильний вибір пробної функції, яка містить варіаційні параметри. Зазвичай пробну функцію вибирають у вигляді ряду по степенях енергії, коефіцієнти якого є підгоночними параметрами і визначаються умовою найкращого співпадання теоретичних та експериментальних результатів.

Слід також звернути увагу на те, що екстремальні значення варіаційного функціонала реалізуються на деякій функції, яка є розв'язком кінетичного рівняння. Це означає, що якщо пробна функція не сильно відхиляється від істинного розв'язку, то варіація першого порядку рівна нулю. Таким чином похибка першого порядку при виборі функції призводить до похибки другого порядку у провідності, термо-ЕРС і теплопровідності.

Для пояснення властивостей вузькощілинних напівпровідників із просторово-залежною діелектричною функцією варіаційний метод використовується рідше, ніж наближення часу релаксації, однак він має ряд переваг: метод застосовний для врахування непружного розсіювання носіїв на оптичних фонах, має простіший математичний апарат. Однак варіаційний метод має й свої недоліки. По-перше, важко визначити кількість членів ряду для заданої точності при одержанні результату. По-друге, важливо вдало вибрати пробні функції у вигляді двох, трьох доданків для

### І. Наближення часу релаксації

Розв'язок кінетичного рівняння Больцмана значно спрощується при введенні часу релаксації: коли швидкість зміни функції розподілу внаслідок співударів пропорційна величині відхилення функції від рівноваги, тобто пропорційна  $f - f_0$  [2]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{cr} = -\frac{f - f_0}{\tau(k)}, \quad (1)$$

де  $1/\tau(k)$  – коефіцієнт пропорційності, який залежить від хвильового вектора  $k$ , а  $\tau(k)$  – і є часом релаксації.

Дослідження механізмів розсіювання носіїв заряду зручно проводити на величинах, які можна виміряти експериментально. Найзручнішою у такому випадку є рухливість носіїв заряду  $\mu$ , оскільки, з одного боку, її легко виміряти, а з іншого, теоретичний розрахунок рухливості здійснюють через чутливий до механізмів розсіювання час релаксації [3]:

$$\mu_H = e \left\langle \left[ \tau(\varepsilon) / m_0(\varepsilon) \right]^2 \right\rangle / \left\langle \tau(\varepsilon) / m_0(\varepsilon) \right\rangle, \quad (2)$$

тут кутові дужки визначають усереднення:

$$\langle A(\varepsilon) \rangle = \int_0^\infty (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) k^3(\varepsilon) A(\varepsilon) d\varepsilon / \int_0^\infty (-\partial f_0 / \partial \varepsilon) k^3(\varepsilon) d\varepsilon,$$

$f_0(\varepsilon)$  – функція розподілу носіїв,  $\tau$  – сумарний час

релаксації, який враховує дію всіх механізмів розсіювання носіїв струму у халькогенідах свинцю п-типу провідності і обчислюється згідно правила Маттісена:

$$\tau = \sum_i \frac{1}{\tau_i}, \quad (3)$$

де  $\tau_i$  – час релаксації і-ого механізму розсіювання.

Із чисельних досліджень [1,3-8] слідує, що основними механізми розсіювання, які мають місце у кристалах халькогенідів свинцю, є розсіювання на: кулонівському потенціалі вакансій, короткодіючому потенціалі вакансій, деформаційних потенціалах акустичних та оптичних фононів, поляризаційному потенціалі оптичних фононів.

Вирази для часу релаксації, згідно яких проводились розрахунки в даній роботі, для різних механізмів розсіювання мають вигляд [3-7]:

а) кулонівський потенціал вакансій:

$$\tau_c(x) = \frac{\varepsilon_0^2 (2m^*)^{1/2} (k_0 T)^{3/2}}{\pi (Ze^2)^2 N_v [\ln(1+\xi) - \xi/(1+\xi)]} \times \frac{(x + \beta x^2)^{3/2}}{(1 + 2\beta x)}, \quad (4)$$

де  $\xi = (2kr_v)^2$ ,  $k$  – хвильовий вектор носія,  $r_v$  – радіус екранування потенціалу вакансії,  $N_v = 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  для  $n < 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$  та  $N_v = n/2$  для  $n \geq 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ;

б) короткодіючий потенціал вакансій:

$$\tau_{0,v}(x) = \frac{\tau_{0,v}(x + \beta x^2)^{-1/2}}{(1 + 2\beta x) [(1-A)^2 - B]}, \quad (5)$$

де  $\tau_{0,v} = \pi \cdot \hbar^4 / m^* (2m^* k_0 T)^{1/2} U_{vc}^2 N_v$ ,  $A = \beta x(1-K)/(1+2\beta x)$ ,  $B = 8\beta x(1+\beta x)K/3(1+2\beta x)^2$ ;

в) деформаційний потенціал акустичних фононів: час релаксації при розсіюванні на цьому потенціалі обчислюється за виразом (5), в якому слід прийняти індекс  $v = a$  та переписати вираз для  $\tau_{0,a}$  наступним чином:

$$\tau_{0,a} = 2\pi \hbar^4 C_1 / E_{oc}^2 (2m^* k_0 T)^{3/2}; \quad (7)$$

г) деформаційний потенціал оптичних фононів:

$$\tau_{0,\bar{A}} = \frac{\tau_{0,\bar{A}}(x + \beta x^2)^{-0.5}}{(1 + 2\beta x) [(1-A)^2 - B]}, \quad (8)$$

де

$$\tau_{0,\bar{A}} = 2\hbar^2 a^2 \rho (\hbar \omega_0)^2 / \pi (2m_n k_0 T)^{3/2} E_{0C}^2; \quad (9)$$

д) поляризаційний потенціал оптичних фононів:

$$\tau_{i,\bar{a}\bar{n}}^{-1} = \frac{2^{1/2} e^2 k_0 T m_{d1}^{*1/2}}{\hbar^2 \varepsilon^{1/2}} (\varepsilon_0^{-1} - \varepsilon_0^{-1}) \frac{1 + (2\varepsilon / \varepsilon_G)}{[1 + (\varepsilon / \varepsilon_G)]^{1/2}} \times \left\{ \left[ 1 - \delta_\infty \ln(1 + \delta_\infty^{-1}) \right] - \frac{2\varepsilon(\varepsilon_G + \varepsilon)}{(\varepsilon_G + \varepsilon)^2} \times \left[ 1 - 2\delta_\infty + 2\delta_\infty^2 \ln(1 + \delta_\infty^2) \right] \right\}; \quad (10)$$

У виразах (4)-(10)  $\varepsilon_0$  – статична діелектрична проникність;  $U_{vc}$  – короткодіючий потенціал вакансії;  $E_{ac}$  – деформаційний потенціал вакансії;  $C_1$  –

комбінація пружних констант;  $K = 1,5$  – відношення короткодіючих потенціалів вакансій для зони провідності і валентної зони та деформаційних потенціалів для цих зон;  $x = \frac{E}{k_0 T}$  – приведена енергія

носіїв,  $\beta$  – параметр енергетичної зони,  $\varepsilon_\infty$  – високочастотна діелектрична проникність,  $T$  – температура,  $\hbar$  – постійна Планка,  $k_0$  – постійна Больцмана,  $e$  – заряд вільного електрона,  $\rho$  – густина,  $a$  – постійна ґратки,  $\omega_0$  – частота оптичного фонону,  $\delta_\infty = (2kr_\infty)^{-2}$ ,  $r_\infty$  – радіус екранування оптичних фононів носіями.

## II. Основні положення варіаційного принципу

При застосуванні варіаційного методу у фізиці напівпровідників важливо здійснити вибір певного функціонала  $I$  від деякої функції  $\eta(x)$ , екстремальне значення якого співпадає з істинним функціоналом, коли  $\eta(x)$  є точним розв'язком кінетичного рівняння Больцмана. Варіюючи функціонал  $I$  при вибраній функції  $\eta(x)$ , можна визначити деякий розподіл  $\eta^n(x)$ , відмінний від істинного значення  $\eta^i(x)$ . Оскільки, для визначення кінетичних коефіцієнтів достатньо знати не саму функцію  $\eta(x)$ , а лише означені інтеграли від неї, то їх наближені значення знаходяться із функції  $\eta^n(x)$ , а ефективність методу визначається величиною різниці між  $I^n$  та точним значенням  $I^i$ .

При розгляді вузькозонних напівпровідників слід враховувати, що розсіювання носіїв струму може проходити при участі оптичних фононів, які здатні перекидати носії із зони провідності у валентну зону, і, навпаки. Тому виникає система взаємопов'язаних рівнянь для двох сортів носіїв (електронів і важких дірок). При цьому загальну схему для визначення кінетичних коефіцієнтів переписують для випадку двох типів носіїв і наявності міжзонного оптичного розсіювання.

Функцію розподілу Больцмана у загальному випадку можна записати у вигляді:

$$f(\vec{p}) = f_0(\varepsilon) + a(\varepsilon)\Phi(\vec{p}), \quad (11)$$

де  $a(\varepsilon) = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon}$ ,  $f_0$  – рівноважна функція розподілу,

$\Phi(p)$  – нерівноважна добавка до функції розподілу. Якщо система складається, наприклад, із двох сортів носіїв, то у функцію (11) слід внести відповідні індекси. Систему лінеаризованих лінійних рівнянь формально можна записати так:

$$\sum_{i=1}^n \hat{L}_i \Phi_i(\vec{p}) = X_i. \quad (12)$$

Ліва частина рівняння (12) являє собою

лінеаризований по  $\Phi(\vec{p})$  член, зумовлений зіткненнями, причому, під операторами  $\hat{L}_{ij}$  розуміють лінійну комбінацію операторів  $\hat{L}_{m,i,j}$ , що відповідають різним механізмам розсіювання (індекс вказує на тип механізму розсіювання носіїв):

$$\hat{L}_{ij} = \sum_m \hat{L}_{m,i,j}. \quad (13)$$

Використовуючи стандартну варіаційну процедуру [1] отримують достатньо простий вираз для розрахунку рухливості. У випадку носіїв струму, енергетичний спектр яких описується законом Кейна, він має вигляд

$$\mu = -\frac{enkT}{L_{00}}, \quad (14)$$

де  $n$  – концентрація носіїв струму;  $L_{00}$  – матричні елементи оператора розсіювання носіїв.

При одночасній дії декількох механізмів розсіювання матричні елементи додаються, як і обернені часи релаксації згідно правила Маттісена

$$L_{00} = \sum_i L_{00}^i, \quad (15)$$

де  $i$  – номерує механізм розсіювання. У випадку сильного виродження можна переписати

$$L_{00}^i = \frac{nkTm^*(\varepsilon_F)}{\tau_i}, \quad (16)$$

де  $m^*(\varepsilon_F)$  – ефективна маса носіїв на рівні Фермі,  $\tau_i$  – час релаксації  $i$ -го пружного механізму розсіювання.

Таку саму форму запису для матричних елементів можна зберегти і для випадку непружних механізмів розсіювання, проте час релаксації виявляється складною функцією температури і концентрації. Тоді вираз для рухливості набуває відомої форми

$$\mu = \frac{e\tau(\varepsilon_F, n, T)}{m^*(\varepsilon_F, n, T)}, \quad (17)$$

де  $\tau = \left( \sum_i \tau_i^{-1} \right)^{-1}$  – сумарний час релаксації.

У випадку сильного ферміївського виродження, яке для сполук  $A^{IV}B^{VI}$  реалізується при достатньо низьких концентраціях носіїв і низьких температурах для рухливості носіїв зручно використовувати не вираз (17), а його більш зручну інтерпретацію [8,9]

$$\mu = A(\varepsilon_F, n, T) \sum_i (B_i F_i)^{-1}, \quad (18)$$

де

$$A(\varepsilon_F, n, T) = \frac{\chi_0}{e} \frac{\hbar^3 k_F}{k_0 T} [m^*(\varepsilon_F)]^{-2} \quad (19)$$

має розмірність рухливості, а безрозмірні величини  $B_i$  і  $F_i$  залежать від виду механізму розсіювання носіїв.

Для розглядуваних у п. 1 механізмів розсіювання

носіїв заряду вирази для розрахунку  $B_i$  та  $F_i$  мають вигляд [9-14]:

а) розсіювання на домішкових іонах

$$B_i = \frac{2\pi N_i}{\chi_0 k_0 T} \left( \frac{e}{k_F} \right), \quad (20)$$

$$F_i = \ln(\xi_0 + 1) - \xi_0 (\xi_0 + 1)^{-1} - 4L \left[ 1 + (1 + \xi_0)^{-1} - 2\xi_0^{-1} - 2\xi_0^{-1} \ln(\xi_0 + 1) \right]^+ + \frac{3}{2} L^2 \left[ 1 - 4\xi_0^{-1} + 6\xi_0^{-2} \ln(\xi_0 + 1) - 2\xi_0^{-1} (\xi_0 + 1)^{-1} \right], \quad (21)$$

де

$$\xi_0 = (2k_F \lambda_0)^2; \quad L = \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_g + 2\varepsilon_F}; \quad (22)$$

б) розсіювання носіїв на акустичних коливаннях ґратки:

$$B_{ak} = \frac{\chi_0}{\pi\rho} (k_F D / v_{||}^2)^2, \quad (23)$$

$$F_{ak} \approx 1 - 1, 2L + \left[ 0, 36 + \frac{1}{8} \left( \frac{v_{||}}{v_{\perp}} \right)^2 \right] L^2, \quad (24)$$

де  $\rho$  – густина;  $D$  – константа деформаційного потенціалу; а  $v_{||}$  і  $v_{\perp}$  – поздовжня і поперечна компоненти швидкості звуку у кристалі;

в) розсіювання носіїв на оптичних фонах:

$$B_{opt} = 2(\chi_0 / \chi_{\infty} - 1); \quad (25)$$

$$F_{opt} = S'_{12} - A(\varepsilon_F), \quad (26)$$

де

$$S'_{1k} = \left( \frac{Z}{2k_F \lambda_{\infty}} \right)^2 \lambda_{\infty}^{k-1} \int_0^{\lambda_{\infty}^{-1}} \frac{(2t)^k e^{Z(t)} dt}{4(1+t)^2 (e^{Z(t)} - 1)^2};$$

$$Z(t) = Z \left[ 1 - \left( 1 - \frac{\chi_{\infty}}{\chi_0} \right) (1+t^{-1}) \right]. \quad (27)$$

Тут  $A(\varepsilon_F) = 2L(1 - \frac{3}{4}L)$ ;  $\lambda_{\infty} = \left( \frac{\chi_{\infty}}{\chi_0} \right)^{1/2} \lambda_0$ ;

$t = (q\lambda_{\infty})^2$ ;  $Z$  – енергія поздовжнього оптичного фону при відсутності екранування ( $T \rightarrow \infty$ ) в одиницях  $k_0 T$ . При високих температурах  $k_0 T \sim \frac{\hbar\omega}{2}$  розсіювання носіїв на оптичних фонах можна вважати пружним і є можливість ввести час релаксації. Тоді

$$F_{opt} = A - 2L \left( 1 - \frac{\lambda}{4} \right) B + L^2 C, \quad (28)$$

де

$$A = 1 - \frac{2}{\xi_{\infty}} \ln(\xi_{\infty} + 1) + (\xi_0 + 1)^{-1}, \quad \xi_{\infty} = (2k_F \lambda_{\infty})^2,$$

$$B = 1 - 4\xi_{\infty}^{-1} + 6\xi_{\infty}^{-2} \ln(\xi_{\infty} + 1) - 2\xi_{\infty}^{-1} (\xi_{\infty} + 1)^{-1},$$

$$C = 1 - 3\xi_{\infty}^{-1} + 9\xi_{\infty}^{-2} - 12\xi_{\infty}^{-3} \ln(\xi_{\infty} + 1) +$$

$$+ 3\xi_{\infty}^{-1} (\xi_{\infty} + 1)^{-1}$$

Якщо знехтувати екрануванням, то величини  $A$ ,

В і С у (28) дорівнюватимуть одиниці. Тоді

$$F_{opt} = 1 - 2L + \frac{3}{2}L^2; \quad (29)$$

г) розсіювання на короткодіючій частині потенціалу вакансій:

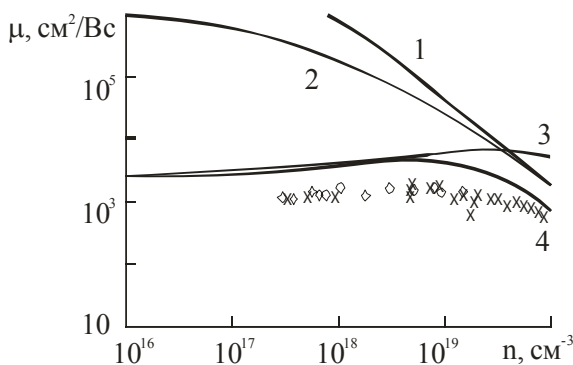
$$B_{ei \dot{d}i \dot{n} \epsilon.} = \frac{\chi_0 N_D (3\pi^2 n)^{2/3} (U_c^{(i)})^2}{e^2 \pi k_0 T}, \quad (30)$$

де  $N_D = N_a$  – концентрація вакансій;  $U_c^{(i)}$  – розсіюючий потенціал. Вираз для  $F_{ei \dot{d}i \dot{n} \epsilon.}$  співпадає із аналогічним для випадку розсіювання носіїв на деформаційному потенціалі акустичних фононів.

### III. Результати та обговорення

Для перевірки наведених вище теоретичних результатів проаналізовано внески окремих механізмів розсіювання у розрахунок рухливості носіїв заряду. Враховуючи те, що на сьогоднішній день переважна більшість таких розрахунків базувалася на застосуванні наближення часу релаксації, автори зробили також порівняльний аналіз цих двох методів: варіаційного підходу та наближення часу релаксації.

На рис. 1 наведено концентраційні розрахункові залежності рухливості носіїв заряду кристалічного телуриду свинцю при врахуванні різних механізмів розсіювання: на короткодіючому потенціалі вакансій, на деформаційному потенціалі акустичних фононів та на поляризаційному потенціалі оптичних фононів. Дані по цих же механізмах розсіювання, але обчислених на основі наближення часу релаксації показано на рис. 2. Видно, як перший, так і другий методи дають правильну якісну оцінку для пояснення впливу того чи іншого механізму розсіювання у сумарний ефект.



**Рис. 1.** Залежності рухливості носіїв заряду для кристалів РbТе від їх концентрації, розраховані варіаційним методом, при різних механізмах розсіювання (Т = 300 К):

1 – короткодіючому потенціалі вакансій, 2 – акустичних фононах, 3 – оптичних фононах, 4 – сумарне розсіювання згідно (4); Δ, x, o, ◇ – експеримент [7].

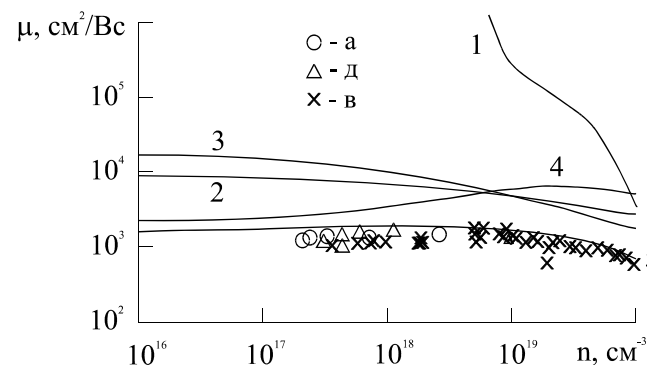
Так, реалізація розсіювання на короткодіючому потенціалі вакансій при Т = 300 К в кристалах телуриду свинцю (рис. 1, рис. 2 – крива 1) здійснюється в області концентрацій  $\sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$ .

Розсіювання на фононах, яке домінує при кімнатних температурах, розглядалося в основному через дві складові: на деформаційному потенціалі акустичних фононів та на поляризаційному потенціалі оптичних фононів. Оптичні полярні фонони дають домінуючий внесок у сумарне розсіювання в широкій області концентрацій, причому, більш виражено розсіювання на них проявляється при аналізі за допомогою варіаційного підходу (в інтервалі концентрацій  $1 \cdot 10^{16} - 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ). У наближенні часу релаксації концентраційний інтервал домінування цього механізму дещо вужчий ( $1 \cdot 10^{16} - 2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ). Тобто, перша розбіжність між двома розглядуваними підходами чітко проявилася на реалізації саме цього механізму розсіювання.

Розсіювання ж на акустичних фононах суттєве, і в обох підходах дає добре якісне пояснення експериментальних даних. Однак по числовому значенню внесок цього розсіювання більш вагомий, якщо брати до уваги наближення часу релаксації.

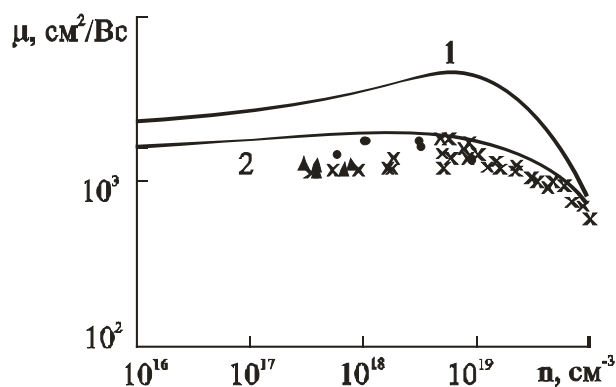
У чому ж причина такої відмінності представлення тих самих процесів (механізмів розсіювання носіїв заряду) при використанні різних математичних моделей?

В загальному кожна модель непогано описує експеримент (рис. 3.). Як видно із рис. 3., на якому наведено сумарні значення рухливості, але обчислені різними підходами, використання наближення часу релаксації дає правильну кількісну картину для широкого температурного діапазону, а варіаційний метод дає добре якісне узгодження (форма теоретичної кривої краще співпадає із експериментальними точками).

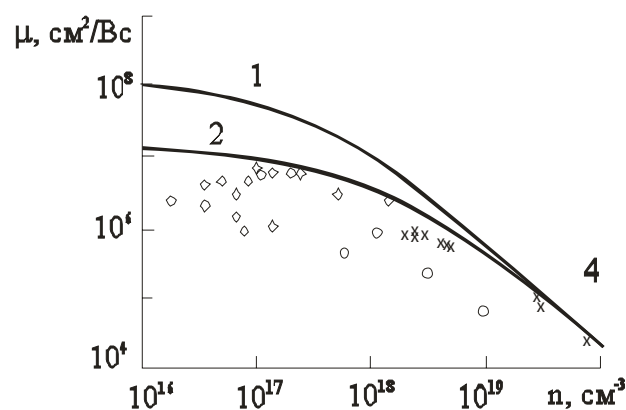


**Рис. 2.** Залежності рухливості носіїв заряду для кристалів РbТе від їх концентрації, розраховані в наближенні часу релаксації, при різних механізмах розсіювання (Т = 300 К):

1 – короткодіючому потенціалі вакансій, 2, 3 – акустичних фононах, 4 – оптичних фононах, 5 – сумарне розсіювання згідно (4); Δ, x, o, ◇ – експеримент [7].



**Рис. 3.** Залежності рухливості від концентрації носіїв заряду для кристалів PbTe при врахуванні сумарної дії різних механізмів розсіювання, розрахованої згідно виразу (15) ( $T = 300$  K):  
1 – варіаційний метод, 2 – метод часу релаксації.  
 $\Delta$ ,  $\times$ ,  $\bullet$  – експеримент [7].



**Рис. 4.** Залежності рухливості від концентрації носіїв заряду для кристалів PbTe при врахуванні сумарної дії різних механізмів розсіювання, розрахованої згідно виразу (15) ( $T = 4,2$  K):  
1 – варіаційний метод, 2 – метод часу релаксації.  
 $\circ$ ,  $\times$  – експеримент [7].

Схожа картина (деяка візуальна неузгодженість результатів) спостерігається і при інших температурах, чи для інших матеріалів. Для порівняння наведено дані для PbTe при 4,2 K (рис. 4.).

Отримані відмінності у поясненні експериментів обумовлені, по-перше, у самих методах, а також у критеріях їх застосовності та у підходах, які лежать у кожному з методів. Наближення часу релаксації дуже поширене, однак його не завжди правомірно застосовувати. Зокрема, при розгляді міжелектронних зіткнень, чи, коли інші непружні механізми розсіювання мають перевагу. Тоді слід шукати інші методи розв'язання рівняння Больцмана.

Згідно із теорії варіаційного принципу, опис явищ переносу доцільний для детального опису вже наперед встановлених (відомих) механізмів

розсіювання. У такому випадку можна обмежитися розглядом одного механізму розсіювання, який домінує у певному інтервалі концентрацій та температур. Для цього механізму розсіювання розв'язується варіаційна задача, вибираються підгоночні коефіцієнти (які, як було показано вище володіють певним фізичним змістом), і вже на основі цих підібраних коефіцієнтів здійснюється розрахунок тих чи інших кінетичних параметрів. Математичний апарат при цьому не буде надто складним, що значно спрощує розрахунок, а результат – дуже точний. Однак, якщо ставиться задача пояснити фізику процесів розсіювання носіїв заряду, слід визначити умови домінування того чи іншого механізму розсіювання – незамінним буде наближення часу релаксації.

**Таблиця**

Розрахункові величини та деякі характеристики PbTe ( $T = 300$  K)

Стала ґратки	$a, 10^{-10}$ м	6,452
Густина	$\rho, 10^3$ кг/м <sup>3</sup>	8,16
Температура Дебая	$T_{\theta},$ K	125
Ширина забороненої зони	$E_g,$ eV	0,32
Температурний коефіцієнт ширини забороненої зони	$dE/dT, 10^{-4}$ eV/K (77-300 K)	4
Поздовжня компонента (p)	$m_{p  }^*$	$0,022 \pm 0,003$
Поперечна компонента (p)	$m_{p\perp}^*$	$0,31 \pm 0,05$
Поздовжня компонента (n)	$m_{n  }^*$	$0,24 \pm 0,003$
Поперечна компонента (n)	$m_{n\perp}^*$	$0,24 \pm 0,05$
Діелектрична проникність статична	$\epsilon_0$	400
Комбінація пружних констант	$C_1, 10^{10}$ Н/м <sup>2</sup>	7

## Висновки

1. Приведено вирази для розрахунку рухливості носіїв струму у напівпровідниках з врахуванням різних механізмів розсіювання для випадку використання наближення часу релаксації.
2. Викладено елементи варіаційного принципу розв'язання рівняння Больцмана і аналізу явищ переносу у напівпровідникових сполуках AIVBVI.
3. Розраховано залежність рухливості носіїв струму для кристалів n-PbTe від концентрації при 4,2 К і 300 К згідно наближення часу релаксації та варіаційним методом.
4. Встановлено, що результати розрахунків рухливості як на основі варіаційних підходів, так і у наближенні часу релаксації дають добре якісне співпадання із експериментом.
5. Показано, що якщо метод часу релаксації доцільно використовувати для встановлення

загальної картини явищ переносу, то варіаційний принцип буде корисним при аналізі вже відомого механізму розсіювання носіїв струму у напівпровідниках.

*Робота частково фінансується за рахунок проекту МОН України (Державний реєстраційний номер 0106U000220).*

**Автори висловлюють щире подяку проф. Шендеровському В.А. за постановку задачі дослідження, обговорення результатів та цінні зауваження.**

**Фреїк Д.М.** – заслужений діяч науки і техніки України, академік АН ВШ України, доктор хімічних наук, професор;

**Никируй Л.І.** – кандидат фізико-математичних наук, доцент,;

**Ільків О.І.** – аспірант;

**Возняк О.М.** – кандидат фізико-математичних наук, доцент.

- [1] П.Н. Горлей, П.Н. Шендеровский. *Вариационный метод в кинетической теории*. Наукова думка, К. 296 с. (1992).
- [2] Б.М. Аскеров. *Кинетические эффекты в полупроводниках*. Наука, Л. 112 с. (1970).
- [3] Д.М. Заячук. К вопросу о доминирующих механизмах рассеяния в теллуриде свинца // *ФТП*, **31**(2), сс. 217-220 (1997).
- [4] Ю.И. Равич, Б.А. Ефимова, И.А. Смирнов. *Методы исследования полупроводников в применении к халькогенидам свинца PbSe, PbTe, PbS*. Наука, М. 384 с. (1968).
- [5] Yu.I. Ravich, B.A. Efimova, V.I. Tamarchenko. Scattering of current carriers and transport phenomena in lead chalcogenides. I. Theory // *Phys. Stat. Sol. (b)*, **43**(1), pp. 11-33 (1971).
- [6] Yu.I. Ravich, B.A. Efimova, V.I. Tamarchenko. Scattering of current carriers and transport phenomena in lead chalcogenides. II. Experiment // *Phys. Stat. Sol. (b)*, **43**(2), pp. 453-469 (1971).
- [7] Л.І. Никируй. Механізми розсіювання носіїв струму та оптимізація термоелектричних властивостей кристалів PbTe, PbSe, PbS n-типу провідності. *Автореферат дис. канд.фіз.-мат.н.* Луцьк, **18** с. (2004).
- [8] W. Zawadsky, W. Szymanska. Elastic Electron Scattering in InSb-type semiconductors // *Phys. Stat. Sol. (b)*, **45**, 415-432 (1971).
- [9] П.Н. Горлей, П.Н. Шендеровский. Явления переноса в узкощелевых полупроводниках PbTe, Pb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Te, PbSe: *Препр. / АН УССР, Ин-т физики*; **10**, К., 39 с. (1979).
- [10] П.М. Томчук, И.И. Пинчук. Вариационный метод в теории кинетических коэффициентов: *Препр. / АН УССР, Ин-т физики*; **19**, К., 40 с. (1974).
- [11] П.М. Томчук, И.И. Пинчук. Применение вариационного метода в теории электрон-фононного увлечения в полупроводниках и металлах: *Препр. / АН УССР, Ин-т физики*; **8**, К., 40 с. (1976).
- [12] П.Н. Шендеровский, П.Н. Горлей, И.И. Тарасюк, Ф.Ф. Сизов. Кинетические явления в узкощелевых полупроводниках: *Препр. / АН УССР, Ин-т физики*; **10**, К., 45 с. (1982).
- [13] W. Zawadsky. Electron transport phenomena in small-gap semiconductors // *Advances in Physics*, **23**(3), pp. 435-522 (1974).
- [14] W. Szymanska. Zjawiska transportu elektronowego w chalcogenidkach ołowiu // *Postery Fiziki*, **26**(1), pp. 5-16 (1975).

D.M. Freik, L.I. Nykyruy, O.I. Iljkiv, O.M. Voznyak

## Time Relaxation Method and Variation Procedure in the Transport Phenomena Analysis on AIVBVI Semiconductors

*Physical-Technical Department at the Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University, 57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine, E-mail: [intelect@pu.if.ua](mailto:intelect@pu.if.ua)*

The comparative analysis of the different theoretical approaching which use for a decision of Boltzman equation at research of charge scattering mechanisms in the AIVBVI semiconductors is executed: method of time relaxation and variation approach. Certainly scopes of concentrations and temperature of prevailing of separate scattering mechanisms. Indicated advantages each of the examined approaches.