

Я.С. Буджак<sup>1</sup>, М.О. Галушак<sup>2</sup>, Р.О. Дзумедзей<sup>3</sup>, О. Зуб<sup>1</sup>

## Залежність коефіцієнта Зеебека від температури та товщини плівкових кристалів

<sup>1</sup>Національний університет "Львівська політехніка"

вул.С.Бандери 12, м.Львів-13, 79013, Україна

<sup>2</sup>Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,  
15, Carpathka Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine

<sup>3</sup>Фізико-хімічний інститут Прикарпатського університету імені Василя Стефаника  
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76025, Україна, E-mail: [freik@pu.if.ua](mailto:freik@pu.if.ua)

Показано, що за допомогою вибірки експериментальних залежностей коефіцієнта Зеебека від температури можна визначити ряд важливих параметрів кристала. Вивчено вплив просторового квантування на хімічний потенціал і коефіцієнт Зеебека в тонких плівках.

Стаття поступила до редакції 03.04.2009; прийнята до друку 15.06.2009.

У тонких кристалічних плівках має місце просторове квантування спектру носіїв струму, яке призводить до залежності коефіцієнта Зеебека від їх товщини [1].

З метою встановлення цього зв'язку спочатку розглянемо експериментальні дані для коефіцієнта Зеебека кристалів Ge р-типу провідності (рис. 1.) [2].

Відомо [2], що валентна зона германію має складну структуру, а дірки в ній описуються складним законом дисперсії. Але, як показано в роботі [3], цей закон успішно апроксимується ізотропним параболічним законом дисперсії з відносною ефективною масою  $m_p^* = 0.37$ , яка дорівнює ефективній масі густини станів. Такі дірки в досліджуваному інтервалі температури (рис. 1.) розсіюються на теплових фонах кристалічної ґратки. Тому коефіцієнт Зеебека для такого кристала визначається згідно [3]:

$$\alpha(\mu^*) = \left(\frac{k}{e}\right) \left\{ \frac{F_{r+2}(\mu^*)}{F_{r+1}(\mu^*)} - \mu^* \right\} \quad (1)$$

У цій формулі  $k$ -постійна Больцмана,  $e$ -величина заряду електрона,  $\mu^* = \frac{\mu}{kT}$  - приведений хімічний потенціал,  $T$ -температура кристала,  $F_r(\mu^*)$ - відомий інтеграл Фермі,  $r$  - показник механізму розсіювання (для розсіювання на фонах  $r = 0$ ).

Хімічний потенціал  $\mu^*$  носіїв струму у кристалах, за умов  $-\infty \leq \mu^* \leq 1.2$  і відсутності переходів можна

розрахувати за відомим алгоритмом [4]:

$$\mu^* = \mu^*(N_d, N_a, E_a, T), \quad (2)$$

де  $N_d, N_a, E_a$  - концентрації донорів, акцепторів та енергія іонізації акцепторів.

Тоді згідно (1) і (2) отримаємо:

$$\alpha(\mu^*) = \alpha(N_d, N_a, E_a, T). \quad (3)$$

Тут права частина - це скорочений запис формули (1), в яку замість  $\mu^*$  внесено його значення

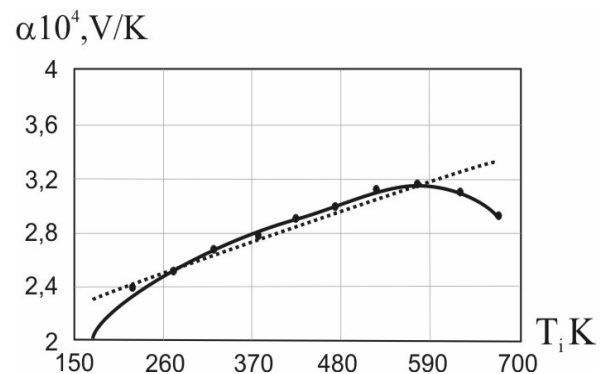


Рис. 1. Залежність коефіцієнта Зеебека від температури для кристалів р-Ge. Концентрація акцепторної домішки  $N_a = 10^{18} \text{ см}^{-3}$  ( — — експеримент, - - - - теорія).

згідно (2).

Співвідношення (3) дає можливість у середовищі MathCAD організувати систему нелінійних рівнянь, за допомогою яких можна розрахувати невідомі параметри кристала  $N_a$ ,  $N_d$  та  $E_a$ .

З цією метою розглянемо експериментальні дані при трьох різних значеннях коефіцієнта Зеебека  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  для  $T_1 < T_2 < T_3$ . Розписавши очевидну рівність  $\alpha_i = \alpha(N_a, N_d, E_a, T_i)$  для цих температур, одержимо систему трьох нелінійних рівнянь для визначення концентрацій легуючих домішок та енергії активації. Ця система має такий вигляд:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \alpha(N_a, N_d, E_a, T_1); \\ \alpha_2 &= \alpha(N_a, N_d, E_a, T_2); \\ \alpha_3 &= \alpha(N_a, N_d, E_a, T_3). \end{aligned} \quad (4)$$

Отримана система рівнянь у середовищі MathCAD розв'язується за допомогою вчислювальних блоків Given/Find, або Given/Minerr.

Розрахунки показали, що  $N_a = 3.47 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ ,  $N_d \approx 0$ , а  $E_a = 0.022 \text{ eV}$ . Для цих параметрів за формулою (2) розраховані значення хімічного потенціалу та коефіцієнта Зеебека. Результати на рис.1. (пунктирна крива).

Для плівки товщиною  $d \approx 10^{-5} \text{ см}$  хімічний потенціал дірок і коефіцієнт Зеебека залежать від товщини, як показано на рис.2. Ця залежність зумовлена просторовим квантуванням енергетичного спектру дірок.

Використовуючи метод розрахунку приведенного хімічного потенціалу, згідно [4], можна показати, що

для кристалів р-типу провідності в умовах просторового квантування він описується таким алгоритмом:

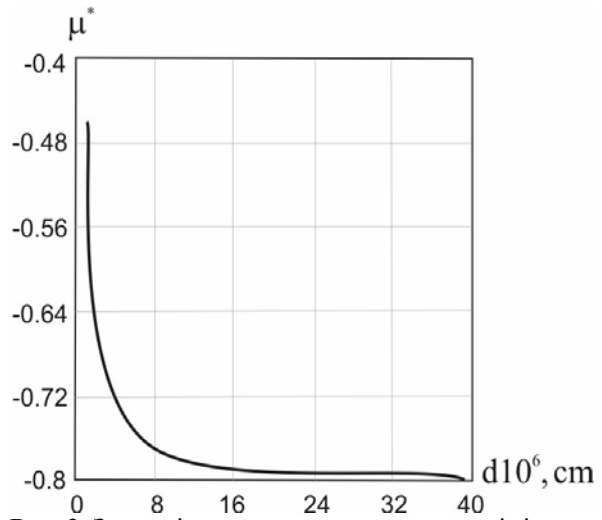


Рис. 2. Залежність приведенного хімічного потенціалу  $\mu^*$  плівок р-Ge від товщини  $d$  при  $T = 300 \text{ К}$ .

$$\mu^*(N_d, N_a, E_a, d, T) = \ln \left( \frac{Y(N_a, N_d, E_a, d, T)}{Zp(T)} \right). \quad (5)$$

$$Y(N_a, N_d, E_a, d, T) = \frac{|Lp(N_a, N_d, E_a, d, T)|}{2} \cdot \left( \sqrt{1 + 4 \cdot \frac{Qp(N_a, N_d, E_a, d, T)}{Lp(N_a, N_d, E_a, d, T)^2} - \frac{Lp(N_a, N_d, E_a, d, T)}{|Lp(N_a, N_d, E_a, d, T)|}} \right);$$

$$Qp(N_a, N_d, E_a, d, T) = \frac{(N_a - N_d) \cdot pa(T, E_a)}{0.5 \cdot \left( \Omega p(d, T) + \frac{N_d}{Zp(T)} \cdot C \right)};$$

$$Lp(N_a, N_d, E_a, d, T) = \frac{pa(T, E_a)}{0.5 \cdot \left( \Omega p(d, T) + \frac{N_d}{Zp(T)} \cdot C \right)} \cdot \left( \Omega p(d, T) + 0.5 \cdot \frac{N_d}{pa(T, E_a)} + (N_d - N_a) \cdot \frac{C}{Zp(T)} \right);$$

У цьому алгоритмі для зручності записів використані такі позначення:

$$Zp(T) = 2 \cdot \left( \frac{2 \cdot \pi \cdot m_0 \cdot m_p^*}{h^2} \right)^{3/2};$$

$$pa(T, E_a) = Zp(T) \cdot \exp \left( -\frac{E_a}{kT} \right);$$

$$\Omega p(d, T) = \left( \theta p(d, T) - \sqrt{\frac{1}{xp(d, T)}} \right);$$

$$\theta p(d, T) = 1 + 2 \cdot \sum_{n=1}^{1000} \exp \left( -\pi \cdot xp(d, T) \cdot n^2 \right);$$

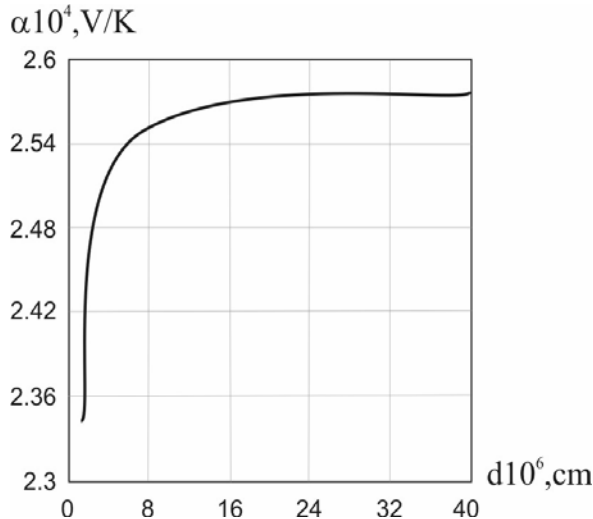
$$xp(d, T) = \frac{8 \cdot \pi \cdot m_0 \cdot m_p^* \cdot k \cdot T \cdot d^2}{h^2}.$$

Тут  $h$  – постійна Планка,  $m_0$  – маса вільного електрона,  $d$  – товщина кристалічної плівки,  $C = 0.27$ .

Залежність хімічного потенціалу  $\mu^*$  від товщини  $d$  плівок зумовлена просторовим квантуванням енергетичного спектру носіїв струму. Вплив цього квантування на хімічний потенціал описується

$$\text{функцією } \Omega p(d, T) = \left( \theta p(d, T) - \sqrt{\frac{1}{xp(d, T)}} \right). \quad (6)$$

Видно, що для гіпотетично прогнозованого тонкого плівкового кристала товщиною  $d > 4 \cdot 10^{-5}$  см функція  $\Omega p(d, T) \cong 1$ . При цій умові



**Рис. 3.** Залежність коефіцієнта Зеебека  $\alpha$  плівок p-Ge від товщини  $d$  при  $T = 300$  К.

розрахований алгоритм (5) співпадає з алгоритмом (2), для масивних кристалів, в яких просторове квантування відсутнє. Отже такий тонкий кристал –

плівка товщиною  $d > 4 \cdot 10^{-5}$  см можна вважати масивним, і в ньому відсутнє просторове квантування. Якщо ця умова для кристала порушується, то в ньому приведений хімічний потенціал і коефіцієнт Зеебека залежать від його товщини (рис. 2; 3). Видно, що для тонких кристалів – плівок мають місце чіткі кореляційні залежності приведенного хімічного потенціала  $\mu^*$  і коефіцієнта Зеебека  $\alpha$  від товщини, що свідчить про наявність просторового квантування. Крім того розрахунки показують, що товщина плівок впливає на ступінь виродження носіїв струму, а це є важливим при виготовленні різних приладних наноструктур на їх основі.

*Робота частково фінансується МОН України (державний реєстраційний номер 0109U001414) та ДФФД МОН України (державний реєстраційний номер 0109U004505).*

**Буджак Я.С.** – доктор фізико-математичних наук, професор;  
**Галушак М.О.** – доктор фізико-математичних наук, проректор;  
**Дзумедзей Р.О.** – аспірант;  
**Зуб О.** – аспірант.

- [1] Я.С.Буджак, Д.М. Фреїк, В.Ф. Пасічник. До питання про кореляційні залежності кінетичних властивостей тонких плівок від їх товщини // *Фізика і хімія твердого тіла*, 8(3) сс. 463-466 (2007).
- [2] У. Данлеп. *Введение в физику полупроводников*. Издание иностр. литературы, Москва. сс. 270-273 (1959).
- [3] Я.С. Буджак, С.С. Варшава, І.П. Термoe.p.c. ниткоподібних кристалів Si-Ge.// *Вісн. НУ "Львівська політехніка"* (393), сс. 64-68 (2000).
- [4] Я.С. Буджак. Хімічний потенціал як важлива характеристика електронного переносу в легованих кристалах // *VI Міжнародна школа- конференція "Актуальні проблеми фізики напівпровідників"*.Тези доповідей. Дрогобич, Україна 23-26 вересня 2008 року. сс. 75,76.

Ya.S. Budzhak<sup>1</sup>, M.O. Galuschak<sup>2</sup>, R.O. Dzumedzey<sup>3</sup>, O. Zub<sup>1</sup>

## Dependences Zeebek's Coefficient From Temperature and Thickness Film Crystals

<sup>1</sup>National University "Lviv Polytechnics"

12, Bandery Str., Lviv-13, 79013, Ukraine

<sup>2</sup>Ivano-Frankivsk National Technical University of Oil and Gas,

15, Carpatska Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine

<sup>3</sup>Physical-chemical institute at the Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University

57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine, E-mail: fciss@pu.if.ua

In this work we can see, that by the selection of experimental dependences Zeebek's coefficient from temperature is possible to determine the row important internal crystal parameters. It is also rotined in-process, as a spatial quantum influences on chemical potential and coefficient of Zeebek's in the monocrystal thin-films which synthesized from material, from which the probed crystal was synthesized.