ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 8, № 3 (2007) С. 463-465

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 8, № 3 (2007) P. 463-465

УДК 621.315.592

ISSN 1729-4428

Я.С. Буджак[1], Д.М. Фреїк[2], В.Ф. Пасічняк[2]

До питання про кореляційні залежності кінетичних властивостей тонких плівок від їх товщини

[1]Національний університет "Львівська політехніка", вул. С. Бандери 12, м. Львів-13, 79013;
[2]Прикарпатський національний університет ім.. В.Стефаника
вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76000

В роботі обґрунтовано критерій просторового квантування спектру носіїв струму в тонких провідних плівках. В зв'язку з цим кінетичні властивості тонких плівок та концентрація носіїв зарядів в них корелюють з їхніми товщинами.

Ключові слова: потенціал Гіббса, ентропія, густина електричного струму та теплового потоку.

Стаття поступила до редакції 07.02.2007; прийнята до друку 15.06.2007.

Вступ

Кінетичні властивості кристалів обумовлюються концентрацією носіїв струму в кристалах та характером їх направленого руху в міжвузлях кристалічної гратки. Такий направлений рух виникає під дією збурень, які виводять кристал із стану термодинамічної рівноваги, а газ носіїв струму стає нерівноважним.

В статистичній фізиці термодинамічні та кінетичні властивості такого газу описуються великим термодинамічним потенціалом Гіббса [1]

$$\Omega = -2kT\sum_{\vec{k}} ln\left[exp\left(\frac{\mu + \Delta\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k})}{kT} \right)\right]. \qquad (1)$$

В цій формулі *к*-постійна Больцмана, T – температура кристала, $\vec{k}$ – хвильовий вектор носія заряду, який відіграє роль квантового числа, $\varepsilon = \varepsilon(\vec{k})$ – закон дисперсії носіїв зарядів, μ – хімічний потенціал, а $\Delta\varepsilon(\vec{k})$ – зміна енергії носія заряду під дією збурень, які виводять кристал із стану термодинамічної рівноваги.

Значення $\Delta\varepsilon(\vec{k})$ розраховане в роботі [1]. Це збурення є парною функцією вектора $\vec{k}$ і тотожно дорівнює нулю $\left(\Delta\varepsilon(\vec{k}) = 0\right)$ в стані термодинамічної рівноваги кристала.

Кількість частинок в кристалі N_e та їх ентропія S_e мають такі значення:

$$N_e = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_T = 2\sum_{\vec{k}} \frac{1}{\left(exp\left(\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \Delta\varepsilon(\vec{k}) - \mu}{kT} \right) + 1 \right)} = 2\sum f_{\vec{k}}\,, \qquad (2)$$

$$f_{\vec{k}} = \frac{1}{\left(\exp\left(\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \Delta\varepsilon(\vec{k}) - \mu}{kT} \right) + 1 \right)}, \qquad (2a)$$

$$S_e = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_\mu . \qquad (3)$$

В цих формулах $f_{\vec{k}}$ – функція розподілу для нерівноважних носіїв зарядів. В стані термодинамічної рівноваги величина $\Delta\varepsilon(\vec{k}) = 0$, тому в цьому випадку функція (2а) співпадає з рівноважною функцією розподілу Фермі-Дірака

$$f_0 = \frac{1}{exp\left(\frac{\varepsilon(\vec{k}) - \mu}{kT} \right) - 1}. \qquad (4)$$

В нерівноважному газі носіїв струму відбуваються процеси дисипації енергії U_e та перенесення електрики і теплоти, які описуються першим та другим законами нерівноважної термодинаміки

$$\frac{dU_e}{dt} = -div\vec{q} + \vec{j}\vec{E}\,, \qquad (5)$$

$$\frac{dS_e}{dt} = \frac{1}{T}\left(\vec{j}\vec{E} - \frac{\vec{q}\nabla_{\vec{r}}T}{T} \right), \qquad (6)$$

де $\vec{j}$ – густина електричного струму, $\vec{q}$ – вектор густини теплового потоку, а $\vec{E}, \nabla_{\vec{r}}T$ – вектори

напруженості електричного поля та градієнта температури в кристалі.

Послідовні розрахунки векторів $\vec{j},\vec{q}$ показують, що вони описуються такими загальними рівняннями

$$\vec{j}=\frac{2ze}{\hbar}\sum_{\vec{k}}\Delta\varepsilon(\vec{k})\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\nabla_{\vec{k}}\varepsilon(\vec{k}), \qquad (7)$$

$$\vec{q}=\frac{2}{\hbar}\sum_{\vec{k}}\left(\varepsilon(\vec{k})-\mu\right)\Delta(\vec{k})\left(-\frac{\partial f_0}{\partial\varepsilon}\right)\nabla_{\vec{k}}\varepsilon(\vec{k}). \qquad (8)$$

I. Теоретичні розрахунки

Рівняння (8) і (9) називаються узагальненими рівняннями електропровідності (8) і теплопровідності (9). В цих рівняннях z – знак заряда, e – величина заряду електрона, $\hbar$ – постійна Планка.

За допомогою цих рівнянь, знаючи величину $\Delta\varepsilon(\vec{k})$, можна розрахувати низку кінетичних властивостей кристалів в тому числі і в тонких кристалічних плівках, в яких спостерігається просторове квантування електронного спектру. Таке квантування приводить до кореляційних залежностей кінетичних властивостей плівок від їх товщини [2,3].

З метою вияснення впливу просторового квантування на кінетичні властивості кристалів розглянемо тонку кристалічну плівку n-типу провідності з просторово-квантованим ізотропним параболічним законом дисперсії для електронного газу.

В такій плівці концентрація електронного газу описується такою формулою [2,3]:

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

$$x_0=\frac{8\pi mkTd^2}{h^2}\qquad \varepsilon_0=\frac{\pi kT}{x_0},\ \mu^*=\frac{\mu}{kT}. \qquad (9)$$

Коефіцієнт Холла R та коефіцієнт ефекту Зеебека цієї плівки розглянемо при умові класично сильного магнітного поля з індукцією $\vec{B}$. Індукція такого поля відповідає умові $(BU_D)^2>>1$, де U_D – дрейфова рухливість носіїв струму.

Ця умова використана для того, що в сильному магнітному полі ці коефіцієнти не залежать ні від механізмів розсіювання, ні від магнітного поля. В цьому випадку сильно спрощуються статистичні розрахунки цих коефіцієнтів, які описуються такими формулами [2,3]:

$$R(d)=\frac{1}{zen(d)}, \qquad (10)$$

$$\alpha(d)=\frac{k}{ze}\left(\frac{\sum_{l=1}^{\infty}\int_{\varepsilon_0 l}^{\infty}\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right)\left(\varepsilon-\varepsilon_0 l^2\right)\left(-\frac{df_0}{d\varepsilon}\right)d\varepsilon}{\sum_{l=1}^{\infty}\int_{\varepsilon_0 l^2}^{\infty}\left(\varepsilon-\varepsilon_0 l^2\right)\left(-\frac{df_0}{d\varepsilon}\right)d\varepsilon}-\mu^*\right). \qquad (11)$$

Цю формулу приведемо до вигляду зручного для розрахунків в середовищі MathCAD

$$\alpha(d)=\frac{k}{ze}\left\{\frac{\int_0^{\infty}\sum_{l=1}^{\infty}\frac{\left(2y+\frac{\pi}{x_0}l^2\right)}{exp\left(y+\frac{\pi}{x_0}l^2-\mu^*\right)+1}dy}{\sum_{l=1}^{\infty}ln\left[exp\left(\mu^*-\frac{\pi}{x_0}l\right)+1\right]}-\mu^*\right\}. \qquad (12)$$

Розрахунки значень коефіцієнта Холла $R(d)$ і безрозмірного коефіцієнта Зеебека $\alpha=\left|\frac{ze}{k}\alpha(d)\right|$ в залежності від температури T і товщини плівки d показані на рис. 1 і рис. 2.

Отже кінетичні властивості тонких плівок корелюють з їх товщинами. Як видно із рисунків ця кореляція спостерігається в плівках товщиною $d\sim(2\div5)\cdot10^{-6}cm.$

Плівки такої товщини дуже тонкі і для їх виготовлення треба застосовувати спеціальні нанотехнології. Тому в звичайній практиці, як, використовуються плівкові зразки в яких

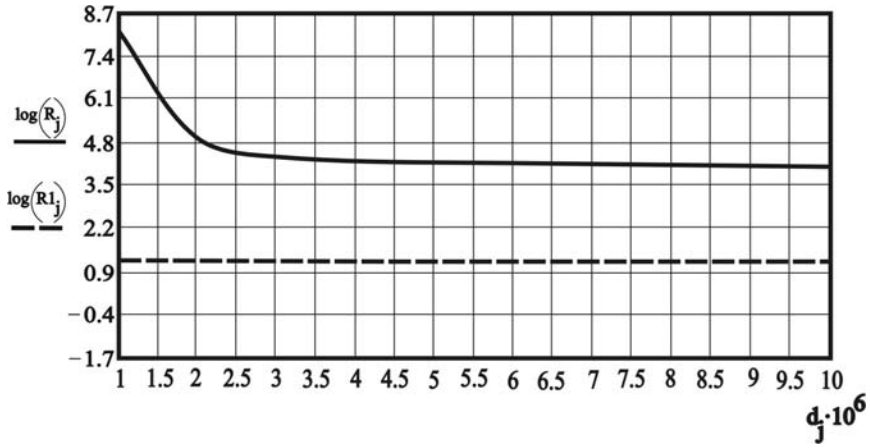

Рис. 1. Залежність коефіцієнтів Холла R і R1 невиродженого електронного газу(μ = -4) від товщини кристалічної плівки d та температури T = 4 K для R і T1 = 300 K для R1

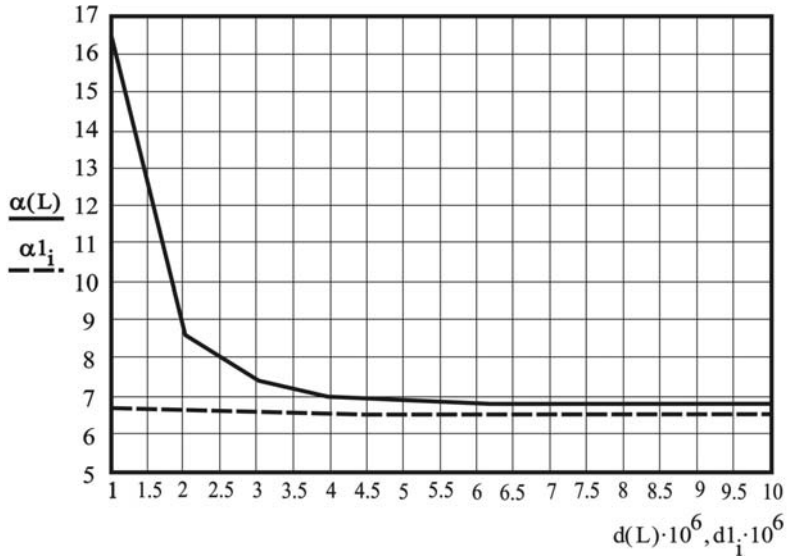

Рис. 2. Залежність безрозмірних коефіцієнтів Зеебека α(L) і α1 невиродженого електронного газу (μ = -4) від товщини плівки d для температури T = 4 K для α(L) і температури T = 300 K для α1.

просторового квантування немає.

Висновки

Більш точний критерій відсутності просторового квантування знайдемо за допомогою формули (9), розрахувавши наближено значення суми в її правій частині.

Тоді маємо

$$n(d) = n(T,\mu^*)\left[1 - \frac{1}{d}\cdot\frac{3.306\cdot10^{-6}}{\left(T/K\right)^{1/2}}\frac{ln\left(exp(\mu^*)+1\right)}{F_{1/2}(\mu^*)}cm\right]. \quad (13)$$

В цій формулі $n(T,\mu^*)$ – концентрація електронного газу в масивному кристалі з параболічним законом дисперсії для носіїв струму. Вона дорівнює

$$n(T,\mu^*) = \frac{4}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2\pi mkT}{h^2}\right)^{3/2} F_{1/2}(\mu^*), \quad (14)$$

де $F_{1/2}(\mu^*)$ – відомий інтеграл Фермі.

Із формули (13) видно, що для відсутності кореляції концентрації електронів та інших кінетичних властивостей від товщини плівки необхідно щоб товщина плівки відповідала умові

$$d >> \frac{3.303\cdot10^{-6}}{\left(T/K\right)^{1/2}}\frac{ln\left[exp(\mu^*)+1\right]}{F_{1/2}(\mu^*)}cm. \quad (15)$$

Ця умова для плівкових структур, як правило, виконується на практиці.

Робота частково фінансується МОН України (Державний реєстраційний номер 0106U00220) та ДФФД МОН України (проект № 14.1/028).

[1] Я.С. Буджак. *Исследование явлений переноса в полупроводниках со сложным зонным спектром*. Автореф. д-ра физ.-мат. наук. Ленинград, (1985).

[2] Я.С. Буджак. Елементи статистичної теорії кінетичних властивостей тонких плівок // *Фізика і технологія тонких плівок.* Матеріали *Ювілейної X Міжнародної конференції. **1**. МКФТТП-X. 16-21 травня*, сс. 34-36 (2005).

[3] Я.С. Буджак Елементи статистичної теорії кінетичних властивостей тонких плівок // *Фізика і хімія твердого тіла*, **6**(3), сс. 366-371 (2005).

J.S. Budzhak[1], D.M. Freik[2], V.F. Pasichnyak[2]

To a Question on Correlation Dependences of the Kinetic Properties Thin Films Depending on Their Thickness

[1]*National university the Lvov Polytechnique S.Bandery's street 12 Lvov, 79013*
[2]*Vasyl Stefanyk PreCarpathian National University, 57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine*

In work it is proved tests of spatially quantization a spectrum of carriers of current in thin condukting films. In this connection the kinetic properties of thin films and concentrations of charge carriers correlate with their thickness.

Key words: potential of Gibbs, an entropy, density of an electric current and a thermal stream.