

Я.С. Буджак, О.В Зуб

Ефект Зеебека в тонких плівках германію р-типу провідності

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

В роботі обґрунтовано вплив просторового квантування енергетичного спектру електронного газу на його концентрацію в тонких пластинкових кристалах.

Ключові слова: хвильова функція, закон дисперсії, ефективна маса.

Стаття постуила до редакції 20.05.2011; прийнята до друку 15.06.2011.

Вступ

Із квантової механіки відомо, що в тонкій кристалічній пластині з мікроскопічною товщиною d може спостерігатися так зване просторове квантування енергетичного спектру носіїв струму, яка приводить до того, що багато властивостей тонкої пластини мають кореляційну залежність від d .

I. Постановка задачі

В квантовій механіці рівняння Шредінгера для такої пластинкової структури розв'язується за допомогою методу розділення змінних.

З цією метою координатні осі (x, y) розташовують в площині кристалічної структури, в якій розміри кристала макроскопічні, а його товщина d , яка відраховується вздовж координатної осі z , має мікроскопічні розміри.

При таких умовах спостереження необхідно вважати, що носії струму в площині кристала рухаються в двохмірному періодичному полі, тому їхня хвильова функція – це відома двохмірна функція Блоха $Y_1(x, y)$, а імовірний закон дисперсії цього руху – простий параболічний

$$e_1(p_x, p_y) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m}$$
, де m – ефективна маса носія струму, p_x, p_y – відповідні компоненти електронного квазіімпульсу [1 - 4].

II. Метод розв'язку та його аналіз

Рух носія заряду вздовж вісі z – еквівалентний рухові в прямокутній потенціальній ямі шириною d

глибиною U eВ. Хвильова функція $Y_2(z)$ і закон дисперсії $e_2(d)$ для носія заряду в стані такого руху теж відомі [1 - 4].

Дальше, використовуючи метод розділення змінних для розв'язку рівняння Шредінгера, легко знайдемо повну хвильову функцію $Y(x, y, z)$ та повний закон дисперсії носія заряду $e(d, p_x, p_y)$ в тонкій провідній кристалічній пластинці з потенціальною ямою обмеженої глибини [5]:

$$Y(\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}) = Y_1(x, y)Y_2(z) \quad (1)$$

$$e(d, p_x, p_y) = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + p \cdot \left(\frac{h^2}{(1 + p_0)^2 \cdot 8\pi m d^2} \right) n^2, \quad (2)$$

де h – постійна Планка, а p_0 – розмірний параметр, який має таке значення:

$$p_0 = \frac{h}{2pd} \sqrt{\frac{2}{mU}}, \quad (3)$$

В цій формулі U – глибина потенціальної ями, в якій може бути $n=1, 2, 3, \dots, n_{\max}$ квантових рівнів енергії (2) за їх зростанням.

$$n_{\max} = \text{floor}\left(\frac{2}{pp_0} + 1\right) \quad (4)$$

В цій формулі функція $\text{floor}(x)$ в середовищі MathCAD означає найбільше ціле число менше або рівне x .

Формула (4) показує, що кількість власних рівнів енергії в потенціальній ямі глибиною U залежить від параметра p_0 (формула 4).

Використаємо тепер цей закон дисперсії для розрахунку концентрації $n(d)$ вільних носіїв струму в даній структурі, аналогічно як це зроблено в

роботах [3 - 6], в яких показано, що при умові (2) $n(d)$ дорівнює

$$n(d, m, T) = \frac{x_0}{2d^3} \sum_{n=1}^{n_{\max}} \ln \left(\exp \left(m^* - \frac{p}{(1+p_0)^2 x_0} n^2 \right) + 1 \right) \quad (5)$$

де для зручності записів використані такі позначення:

$$x_0 = \frac{8pm d^2 kT}{h^2}, \quad m^* = \frac{m}{kT}, \quad \text{де } k - \text{ постійна}$$

Больцмана, T - температура кристала, m - хімічний потенціал носіїв струму.

Виконаємо тепер у формулі (5) наближене сумування за такою відомою формулою:

$$\sum_{n=1}^{n_{\max}} j(n) = \int_0^{n_{\max}} j(n) dn + \frac{1}{2}(j(n_{\max}) - j(0)), \quad (6)$$

$$\text{де } j(n) = \ln \left[\exp \left(m^* - \frac{p}{(1+p_0)^2 x_0} n^2 \right) + 1 \right].$$

Для зручності розглянемо випадок коли $n_{\max} \rightarrow \infty$, тобто, згідно з (4), $p_0 \rightarrow 0$, а для змінної інтегрування n у формулі (6) зробимо заміну

$$n = \sqrt{\frac{x_0(1+p_0)^2}{p}} \cdot \sqrt{x} \approx \sqrt{\frac{x_0}{p}} \cdot \sqrt{x}.$$

Тоді маємо:

$$\begin{aligned} n(d) &= \frac{x_0}{2d^3} \cdot e^{m^*} \sum_{n=1}^{n_{\max}} \exp \left(-\frac{p}{(1+p_0)x_0} n^2 \right) \cdot n^2 = \\ &= 2 \left(\frac{2pmkT}{h^2} \right)^{3/2} \cdot e^{m^*} \cdot \frac{2}{x_0^{1/2}} \cdot \sum_{n=1}^{n_{\max}} \exp \left(-\frac{p}{(1+p_0)x_0} n^2 \right) = n_0(m^*, T) \Omega(p_0, x_0) \end{aligned} \quad (10)$$

де $n_0(m^*, T) = 2 \left(\frac{2pmkT}{h^2} \right)^{3/2} \cdot e^{m^*}$ - концентрація не вироджених носіїв струму в масивному кристалі, а

$$\Omega(p_0, x_0) = \frac{2}{x_0^{1/2}} \cdot \sum_{n=1}^{n_{\max}} \exp \left(-\frac{p}{(1+p_0)x_0} n^2 \right) -$$

функція, яка описує вплив просторового квантування на концентрацію носіїв струму в тонких кристалічних пластинках.

Використовуючи методи регресивного аналізу, який використовувався в роботі [4, 5], можна показати, що для носіїв струму з хімічним потенціалом, який відповідає умові $-\infty \leq m^* \leq 1.2$ формула (5) апроксимується з точністю до 3% таким наближенням:

$$n(m, d) = n(m) \cdot \left[1 - \frac{1}{4d} \sqrt{\frac{h^2}{2mkT}} \cdot \frac{\ln(e^{m^*} + 1)}{F_{1/2}(m^*)} \right], \quad (7)$$

де $n(m^*)$ - концентрація носіїв струму з ізотропним параболічним законом дисперсії і хімічним потенціалом m^* для масивного кристала. Вона дорівнює

$$n(m^*) = \frac{4}{\sqrt{p}} \left(\frac{2pmkT}{h^2} \right)^{3/2} F_{1/2}(m^*), \quad (8)$$

де $F_{1/2}(m^*)$ - відомий інтеграл Фермі.

Із формули (11) видно, що для відсутності кореляції концентрації електронів та інших кінетичних властивостей від товщини плівки необхідно, щоб товщина плівки відповідала умові

$$d \gg \sqrt{\frac{h^2}{32mkT}} \cdot \frac{\ln(e^{m^*} + 1)}{F_{1/2}(m^*)} = \frac{3.303 \cdot 10^{-6}}{(T/K)^{1/2}} \cdot \frac{\ln(e^{m^*} + 1)}{F_{1/2}(m^*)}. \quad (9)$$

На практиці ця умова для плівкових структур виконується дуже часто.

Тепер розглянемо за формулою (5) концентрацію $n(d)$ для не вироджених носіїв струму в пластинковому кристалі при умові $m^* \leq -4$.

В цьому випадку формула (5) набуває такого вигляду:

$$n(d) \approx \frac{n_0(m^*, T)}{1 + 0.27e^{m^*}} \cdot \Omega(p_0, x_0) \approx n(m, T) \Omega(p_0, x_0), \quad (11)$$

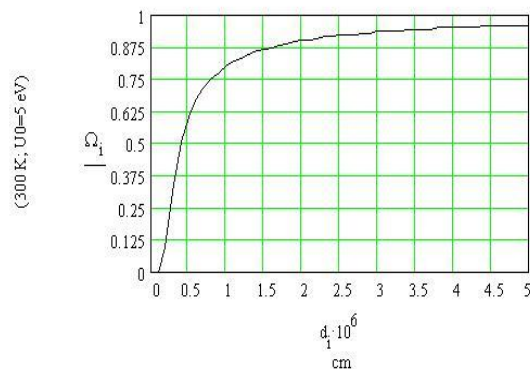


Рис. 1. Залежність $\Omega(p_0, x_0)$ від товщини d кристалічної пластинки.

де $n(m^*, T)$ описується формулою (8).

Функція $\Omega(p_0, x_0)$ через посередництво параметрів p_0 і x_0 залежить від температури T , товщини кристалічної плівки d та глибини потенціальної ями U .

На рис. 1 наведено графік залежності цієї функції від товщини d для кристала з глибиною потенціальної ями $U = 5eV$, що дорівнює деякій

$$M^{<0>} := d \quad M^{<1>} := \mu p \quad M^{<2>} := \alpha p$$

	0	1	2	3	4	5	6	7
$M^T =$	0	$1 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$4 \cdot 10^{-6}$	$5 \cdot 10^{-6}$	$6 \cdot 10^{-6}$	$7 \cdot 10^{-6}$
	1	0	-0.458	-0.648	-0.703	-0.729	-0.745	-0.755
	2	0	$2.34 \cdot 10^{-4}$	$2.471 \cdot 10^{-4}$	$2.509 \cdot 10^{-4}$	$2.528 \cdot 10^{-4}$	$2.539 \cdot 10^{-4}$	$2.546 \cdot 10^{-4}$

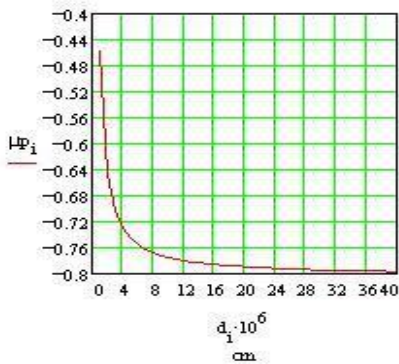


Рис. 2.
Залежність прив.х.п.
від d при $T=300$ К.

середній роботі виходу електрона з кристала при температурі $T = 300$ К .

Коефіцієнт ефекту Зеебека $a(d, m, T)$ для кристалічних структур із законом дисперсії (2) описується такою загальною формулою:

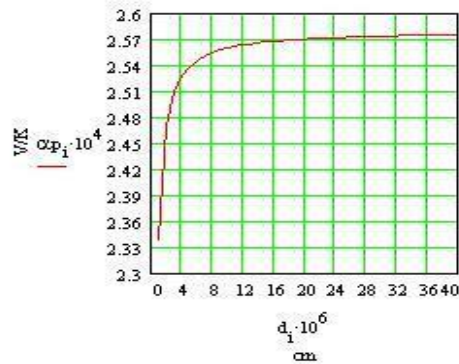
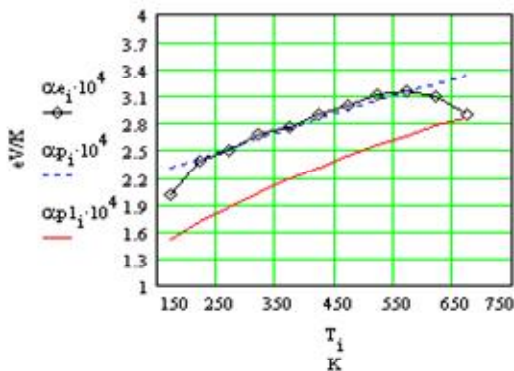


Рис. 3.
Залежність коэф.Зеебека
від d при $T=300$ К.

$$T := M^{<0>} \quad \alpha e := M^{<1>} \quad M^{<2>} := \alpha p \quad M^{<3>} := \mu p \quad M^{<4>} := \mu p_1 \quad M^{<5>} := \alpha p_1$$

	0	1	2	3	4	5	6	7
$M^T =$	0	173	223	273	323	373	423	473
	1	$2 \cdot 10^{-4}$	$2.38 \cdot 10^{-4}$	$2.5 \cdot 10^{-4}$	$2.68 \cdot 10^{-4}$	$2.75 \cdot 10^{-4}$	$2.9 \cdot 10^{-4}$	$3 \cdot 10^{-4}$
	2	$2.305 \cdot 10^{-4}$	$2.403 \cdot 10^{-4}$	$2.516 \cdot 10^{-4}$	$2.632 \cdot 10^{-4}$	$2.746 \cdot 10^{-4}$	$2.855 \cdot 10^{-4}$	$2.959 \cdot 10^{-4}$
	3	-0.406	-0.55	-0.713	-0.875	-1.03	-1.176	-1.312
	4	1.008	0.601	0.283	0.018	-0.212	-0.415	-0.598
	5	$1.504 \cdot 10^{-4}$	$1.703 \cdot 10^{-4}$	$1.877 \cdot 10^{-4}$	$2.033 \cdot 10^{-4}$	$2.177 \cdot 10^{-4}$	$2.311 \cdot 10^{-4}$	$2.436 \cdot 10^{-4}$
	6	523						
	7							



Основні параметри досліджуваного кристала: $\mu p = 0.37$ $E_a = 0.022$

$$N_a = 3.47 \cdot 10^{18} \quad N_d = 2.123 \cdot 10^{16} \quad d = 5 \cdot 10^{-7}$$

Рис.4. Залежність αe , αp , αp_1 від температури

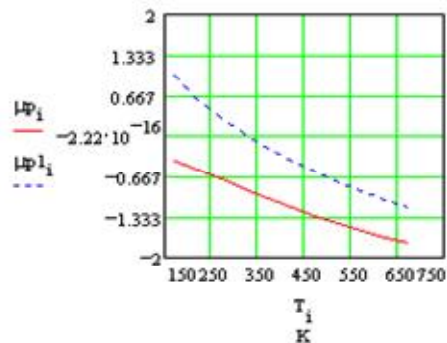


Рис.5. Залежність μp , μp_1 від температури

$$a(d, m^{\bullet}, T) = \left(\frac{k}{e} \right) \cdot \left[\frac{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\left(2y + \frac{p}{(1+p_0) \cdot x_0} \cdot n^2 \right)}{\exp \left(y + \frac{p}{(1+p_0) \cdot x_0} \cdot n^2 - m^{\bullet} \right)}}{\sum_{n=1}^{\infty} \ln \left[\exp \left(m^{\bullet} - \frac{p}{(1+p_0) \cdot x_0} \cdot n^2 \right) + 1 \right]} \right] - m^{\bullet} \quad (12)$$

Для числових розрахунків концентрації носіїв струму в кристалічних структурах та коефіцієнта Зеебека приведений хімічний потенціал розраховувався за допомогою класичного рівняння нейтральності в умовах просторового квантування. Підсумкові розрахунки подаються в роботі у вигляді таблиць і графіків.

На рис. 4. і 5 пунктирними лініями позначені фізичні величини для масивного кристалу германію р-типу провідності з описаними параметрами. Суцільні криві позначають ці самі фізичні величини для плівкового кристалу товщиною $d = 5 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$. Крім того на рис.4. крива, яка позначена ромбиками – це експериментальні значення коефіцієнту ефекту Зеебека в масивному досліджуваному кристалі.

Висновки

Проведені дослідження і розрахунки в даній роботі показують, що в тонких кристалах існують потенціальні ями обмеженої глибини, в яких існує обмежена кількість дискретних і енергетичних рівнів. Це при певних умовах спостереження може стати причиною випромінювання неперервного і

дискретного спектру світла пластинковими кристалами.

Згідно з формулами (3) і (4) збільшення товщини пластинкового кристала веде до збільшення кількості енергетичних рівнів в потенціальній ямі. При товщині d , яка відповідає умові

$$d \gg \frac{h}{2p} \cdot \sqrt{\frac{2}{mU}}$$

в потенціальній ямі обмеженої глибини $U = 5eV$ виникає велика кількість дискретних енергетичних рівнів. Це означає, що рух електрона вздовж вісі Z , яка паралельна товщині кристала, стає квазінеперервним і просторове квантування спектру поступово зникає. Цей процес математично описується графіком на рис. 1.

Буджак Я.С. – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри напівпровідникової електроніки Національного університету «Львівська політехніка»;
Зуб О.В. – аспірантка кафедри напівпровідникової електроніки Національного університету «Львівська політехніка».

- [1] Я.С. Буджак. До питання про просторове квантування в тонких плівках // *Фізика і хімія твердого тіла*, **4(2)**, сс. 234-236 (2003).
- [2] Я.С. Буджак. Елементи статистичної теорії кінетичних властивостей тонких плівок // *Фізика і хімія твердого тіла*, **6(3)**, сс. 366-371 (2005).
- [3] Я.С. Буджак, Д.М. Фреїк, В.Ф. Пасічняк. До питання про кореляційні залежності кінетичних властивостей тонких плівок від їх товщини // *Фізика і хімія твердого тіла*, **8(3)**, сс. 463-465 (2007).
- [4] Я.С.Буджак. Хімічний потенціал як важлива характеристика електронного переносу в легованих кристалах // *Фізика і хімія твердого тіла*, **9(4)**, сс. 686-689 (2008).
- [5] Я.С. Буджак, О.В. Зуб. Тонка кристалічна плівка як квантова розмірна структура // *Східно-Європейський журнал передових технологій*, м. Харків, **44(2)**, сс. 7-10 (2010).

Ya.S. Budzhak, O.V. Zub

Effect of Seebeck in Thin Crystalline Films of Ge p-type Conductivity

The thesis grounds the influence of spatial quantization of electron gas energy spectrum on its concentration in thin lamellar crystals.

Key words: wave function, effective mass, dispersion law.