НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

На правах рукописи

СЕРГЕЕВ Григорий Сергеевич

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ И ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ АНТИМОНИДА ИНДИЯ

Специальность 01.04.02

«Теоретическая физика»

Диссертационная работа на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

2 M

Научный руководитель: к.ф.-м.н., доцент Орлов В.Г.

Москва – 2014

Оглавление

Введение											
Глава 1. Уравнение Больцмана и метод его решения											
1.1 Явления переноса в отсутствии магнитного поля											
1.1.1 Метод решения уравнения Больцмана											
1.1.2 Вычисление кинетических коэффициентов											
1.2 Явления переноса в присутствии магнитного поля											
1.2.1 Метод решения уравнения Больцмана											
1.1.1 Вычисление кинетических коэффициентов											
1.3 Комплекс программ CCTS Solver											
Глава 2. Зонная структура и механизмы рассеяния носителей заряда в InSb 43											
2.1 Зонная структура и волновые функции носителей заряда 43											
2.2 Механизмы рассеяния носителей заряда в InSb 47											
2.2.1 Рассеяние носителей заряда на деформационном											
акустическом потенциале 48											
2.2.2 Рассеяние носителей заряда на оптическом деформационном											
потенциале55											
2.2.3 Рассеяние носителей заряда на полярных оптических											
фононах											
2.2.5 Рассеяние на ионизованных атомах примесей. Рассеяние											
2 2 6 Расседние на коротколейструдощем потещиале 60											
2.2.0 гасселние на короткодсиствующем потенциале											

Глава	3.	Результаты	расчетов	кинетических	коэффициентов	антимонида
индия	<i>n</i> - I	и <i>р-</i> типа				74
	3.1	Обсуждение	физическо	ой модели		74
	3.2	Подвижност	Б			79
	3.3	Проводимост	гь и эффек	т Холла		
	3.4 '	Термоэдс				
	3.5 '	Теплопровод	(НОСТЬ			
Глава	4. T	[°] ермоэлектри	ические сво	ойства		
Заклю	чен	ие				
Прило	жен	ние 1				
Прило	жен	ние 2				
Списо	кл	итературы				

Список обозначений

В работе используются следующие обозначения:

Нижние индексы: е – электроны, h – дырки, hl – «легкие» дырки, hh – «тяжелые» дырки

- *µ* дрейфовая подвижность
- $\mu^{\rm H}$ холловская подвижность
- ао параметр решетки
- *а*_Б эффективный Боровский радиус
- с скорость света
- Е вектор напряженности электрического поля
- е вектор поляризации фонона
- е элементарный заряд
- *f* функция распределения
- *f*₀ равновесная функция распределения
- Н напряженность магнитного поля
- **k** волновой вектор носителя заряда
- *k*_Б постоянная Больцмана
- *m* эффективная масса носителя заряда
- *m*_e⁰ масса изолированного электрона
- *n* концентрация носителей заряда
- N_a концентрация акцепторных атомов
- N_d концентрация донорных атомов
- N_I концентрация примесных атомов
- $N_{\mathbf{q}}$ число фононов с волновым вектором \mathbf{q}
- q волновой вектор фонона
- *R* постоянная Холла
- **r** тройка координат носителя заряда

- r_0 радиус экранирования
- *r*_H множитель холла
- *s* дифференциальная термоэдс
- Т-температура
- *V* объем кристалла
- v скорость носителя заряда с волновым вектором k
- Z-коэффициент термоэлектрической добротности («Figure of merit»)

 Δ — энергия спин-орбитального расщепления валентной зоны в центре зоны Бриллюэна

- *ε*_а энергия ионизации акцепторных примесных атомов
- *ε*_d энергия ионизации донорных примесных атомов
- $\varepsilon_{\rm g}$ ширина запрещенной зоны
- $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ энергия носителя заряда, зависящая от квазиимпульса \mathbf{k}
- *η* химический потенциал
- $\theta_{\rm D}$ температура Дебая
- к удельная теплопроводность
- к₀ статистическая диэлектрическая проницаемость
- к∞ высокочастотная диэлектрическая проницаемость
- $\kappa_{\rm e}$ вклад электронной подсистемы в удельную теплопроводность κ
- $\kappa_{\rm ph}$ фононный вклад в удельную теплопроводность
- ρ плотность кристалла
- σ удельная проводимость
- Ω объем элементарной ячейки
- ω_q частота фонона с волновым вектором ${f q}$

Введение

Узкозонные полупроводники – важный класс полупроводниковых материалов, в который входят такие соединения как HgCdTe, PbTe, InAs, InSb, Bi₂Te₃ [1; 2], используемые в качестве рабочего вещества в детекторах инфракрасного термоэлектрических преобразователях излучения И энергии [1; 3]. Одним из типичных представителей данного класса соединений является антимонид индия (InSb) – узкозонный прямозонный $A^{III}B^{V}$ типа полупроводник c рекордными значениями электронной подвижности, малой эффективной электронной массой [4; 5], гигантскими g фактора свободного пробега значениями И длины электронов проводимости [6].

Данная диссертационная работа посвящена разработке теоретической модели, которая на основе численного решения кинетического уравнения Больцмана в рамках единого подхода позволяет исследовать кинетические коэффициенты антимонида индия в широком диапазоне температур и концентраций примесных атомов. Ранее кинетические свойства InSb теоретически исследовались либо с помощью приближенных аналитических методов [7; 8] (т – приближение и вариационный метод), либо путем численного решения уравнение Больцмана, при этом рассматривались отдельные аспекты кинетических свойств (см., например, [9; 10]).

Теоретическая модель для расчета кинетических коэффициентов антимонида индия, разработанная в диссертации, может быть использована также для исследования кинетических свойств других узкозонных полупроводников. Для этого требуется внести необходимые изменения в матричные элементы рассеяния носителей заряда, учитывающие особенности кристаллической и зонной структуры полупроводника.

Уникальные свойства InSb обусловили его широкое применение в различных прикладных областях. Оптические свойства антимонида индия

активно используются при изготовлении инфракрасных фотоэлементов высокой чувствительности трех основных типов: фотодиодов, фотопроводников и фотомагнитных детекторов [11]. Малая величина запрещенной зоны позволяет использовать датчики из InSb в диапазоне волн 2-7 мкм, недоступном большинству полупроводниковых детекторов. Сильно легированные кристаллы InSb также используют в оптических фильтрах в указанном диапазоне [12; 13].

Рекордные значения подвижности обусловили применение InSb в приборах, основанных на гальваномагнитных эффектах. Антимонид индия используют в высокочувствительных датчиках магнитного поля, работающих на основе эффектов Холла и магнетосопротивления [12].

Термоэлектрические свойства InSb также исследовались [14; 15], но значимого применения в качестве рабочего материала в устройствах для термоэлектрического преобразования энергии InSb не нашел, так как его характеристики уступают параметрам таких термоэлектрических материалов как соединения Bi₂Te₃, PbTe или сплавы Ge-Si.

В последние годы интерес к InSb возобновился как к материалу, перспективному для наноэлектроники (см., например, [16; 17]) и для создания транзисторов нового поколения [18]. Активно исследуются магнетотранспортные эффекты в p-InSb [19]. В 2003 году в США была принята программа ABCS (Antimonide Based Compounds Semiconductors) [20], актуальность что показывает тематики исследования полупроводниковых соединений на основе сурьмы. В 2006 году компаниями US microchip и Intel было объявлено о создании прототипа транзистора на основе InSb, обладающего рекордной производительностью И энергоэффективностью при азотных температурах [21].

Выявлена также лидирующая роль InSb среди соединений типа А^ШВ^V при исследовании возможности использования полупроводниковых

нанопроволок В качестве рабочего материала В устройствах для термоэлектрического преобразования энергии [22; 23; 24].

Фотоэлементы на основе InSb

Датчики инфракрасного излучения на основе антимонида индия применяются с 50-х годов прошлого века [13]. Детекторы, в которых InSb рабочего используется В качестве вещества. получили широкое распространение в медицине, астрономии и военной отрасли. Рабочий диапазон датчиков заключен в интервале длин волн 2-7 мкм [11; 12], который является одним из важнейших для большого числа фотоприемных устройств.

В параметров фотодетектора, качестве одного ИЗ важных определяющего порог его чувствительности, служит удельная обнаружительная способность D^* [11]. Величина D^* для ИК-детекторов на основе InSb может быть оценена с помощью формулы [25]:

$$D^* \sim \frac{\lambda}{\hbar c} \sqrt{\frac{\alpha}{G}}$$
(B.1)

где λ – длина волны детектируемого излучения, \hbar – постоянная планка, c – скорость света, α и G – коэффициенты поглощения излучения и тепловой генерации носителей заряда.

Отношение (α/G) зависит только от свойств вещества и является величиной, характеризующей эффективность применения полупроводника в детекторах ИК-излучения. Используя выражения для коэффициентов α и G из работ [26; 27; 28; 29], можно оценить зависимость (α/G) от ширины запрещенной зоны полупроводника ε_{g} :

$$\frac{\alpha}{G} \sim \left(\hbar\omega - \varepsilon_{\rm g}\right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\varepsilon_{\rm g}}{k_{\rm b}T}\right)^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{\beta\varepsilon_{\rm g}}{k_{\rm b}T}\right) \tag{B.2}$$

здесь T – температура, β – численный коэффициент порядка 2. Из выражения (В.2) видно, что фотоэлементы на основе полупроводниковых соединений широкой запрещенной зоной обладают высокой

С

чувствительностью. Однако, они не чувствительны к длинноволновому излучению, поскольку вещество поглощает фотоны только с энергией большей или равной ширине запрещенной зоны:

$$\hbar\omega \ge \varepsilon_{g} \tag{B.3}$$

Поэтому в длинноволновой области используют полупроводниковые материалы с малыми значениями ширины запрещенной зоны, такие как InSb и Hg_{1-x}Cd_xTe, довольствуясь более низкой чувствительностью, которой, тем не менее, достаточно для практических целей.

Интерес к применению InSb в фотоприемниках обусловлен не только малым значением ширины запрещенной зоны, но и относительно простой и отработанной технологией получения образцов с высокой стехиометрией. Не смотря на возрастающую роль фотоприемников на основе тройных растворов $Hg_{1-x}Cd_xTe$, InSb по-прежнему остается востребованным материалом для большинства фотодетекторов в указанном диапазоне.

Антимонид индия является одним из немногих материалов, который используется в фотодатчиках трех типов: фотопроводящих (фоторезисторы), фотовольтаических (фотодиоды) и фотоэлектромагнитных [11; 12]. Наибольшее распространение получили фоторезисторы и фотодиоды.

Фоторезисторы обычно изготавливают из монокристаллов p-InSb (в качестве примесных атомов чаще всего используют атомы Ge). Реже, высококачественные фотопроводящие элементы изготавливают и из InSb nтипа [11]. Фоторезисторы из InSb успешно используются при комнатных температурах (~300 K), температурах сухого льда (~195 K) и азотных температурах (~77 K) [30].

Рекордные значения подвижности и небольшие времена жизни носителей заряда в антимониде индия обусловили использование InSb в фотоэлектромагнитных детекторах, которые, при соответствующих величинах магнитного поля, в диапазоне длин волн 5-7 мкм эффективнее фотопроводящих датчиков [11]. В качестве материала

фотоэлектромагнитных детекторов применяют p-InSb (при 300 K). Использование фотоэлектромагнитных датчиков при низких температурах наталкивается на технологические сложности охлаждения, поэтому указанные датчики, в основном, используются вблизи комнатных температур [11]. Из-за небольшого времени отклика и малой величины теплового шума фотоэлектромагнитные детекторы на основе антимонида индия имеют хорошие перспективы дальнейшего развития [11].

По сравнению с фоторезисторами, фотодиоды на основе антимонида индия имеют большую чувствительность и меньшую инерционность и используются в широком диапазоне температур от 4 до 160 К [11; 30], применяясь, главным образом, при азотных температурах. На основе фотодиодов из антимонида индия изготавливают как отдельные детекторы, так и современные линейные и двумерные ПЗС- и ПЗИ-матрицы [11] (приборы с зарядовой связью и инжекцией, соответственно) размерностью до 1024 х 1024 элементов, которые находят широкое применение в различных областях.

Несмотря на совершенствование существующих технологий и активную разработку новых методов производства фотодетекторов, на данный момент датчики инфракрасного излучения не достигли теоретически предсказанных характеристик. Поэтому, дальнейшее изучение физических свойств полупроводниковых соединений, используемых при производстве фотодатчиков, актуально и в настоящее время.

Физические свойства

Физические свойства InSb подробно изучены из-за его уникальности [13; 31]. Антимонид индия кристаллизуется в структуре цинковой обманки (сфалерита), пространственная группа – $F\overline{4}3m$ (T_d^2), точечная – $\overline{4}3m$ (T_d) [4; 5; 13; 31]. Зона проводимости сферически симметрична и непараболична. Вблизи минимума, расположенного в центре зоны Бриллюэна, кривизна зоны

проводимости очень велика, вследствие этого электроны обладают чрезвычайно малыми эффективными массами *m*_e [32; 33]:

$$m_{\rm e} = \hbar^2 \left(\frac{d^2 \varepsilon_{\rm k}}{dk^2} \right)^{-1} \bigg|_{k=0}$$
(B.4)

Малые значения *m*_e объясняют еще одно упомянутое выше исключительное свойство InSb – гигантское значение g фактора. Согласно работе [34]:

$$g = 2 \left[1 - \left(\frac{m_{\rm e}^0}{m_{\rm e}} - 1 \right) \frac{\Delta}{3\varepsilon_{\rm g} + 2\Delta} \right]$$
(B.5)

Валентная зона InSb похожа на валентные зоны германия и кремния [13; 33]. В InSb выделяют три зоны дырок: зоны «легких» и «тяжелых» дырок, вырожденных в Г-точке, и зону «отщепленных» дырок, обусловленную спинорбитальным взаимодействием. Зона «легких» дырок, так же как и зона проводимости, непараболична, изотропна и обладает небольшой эффективной массой. Зона «тяжелых» дырок существенно анизотропна и ее максимум несколько смещен относительно Г-точки (это смещение крайне невелико и, по оценке Кейна [13; 35], составляет порядка 0,3% (10⁻⁴ эВ) от расстояния до границы зоны Бриллюэна).

В таблице 1 приведены наиболее важные физические свойства кристаллов InSb в сравнении с другими соединениями типа A^{III}B^V и полупроводниками IV группы.

Таблица 1. Некоторые свойства соединений $A^{III}B^{V}$ и полупроводников IV группы при T = 300 K [5].

	InSb	GaSb	InAs	GaAs	InP	Ge	Si
Постоянная решетки, Å	6,45	6,10	6,06	5,65	5,87	5,66	5,43
Плотность, г∙см ⁻³	5,77	5,61	5,68	5,32	4,81	5,32	2,33
Ширина запрещенной зоны, эВ	0,18	0,70	0,36	1,42	1,35	0,661	1,12
Величина спин- орбитального взаимодействия, эВ	0,81	0,80	0,41	0,34	0,11	0,29	0,044
Эффективная масса электронов, <i>m</i> _e ⁰	0,014	0,042	0,024	0,067	0,077	1,6 0,08	0,98 0,19
Эффективная масса дырок («легких»/ «тяжелых»), <i>m</i> _e ⁰	0,018 0,4	0,4	0,025 0,37	0,082 0,45	0,12 0,55	0,043 0,33	0,16 0,49
Концентрация носителей заряда в недопированном кристалле, см ⁻³	2,0·10 ¹⁶	1,5·10 ¹²	1,0·10 ¹⁵	2,1·10 ⁶	1,3·10 ⁷	2,0·10 ¹³	1,0·10 ¹⁰
Подвижность электронов проводимости, см ² /(В·сек)	80000	5000	30000	8500	5400	3900	1400
Теплопроводность, Вт/(см·К)	0,15	0,4	0,27	0,46	0,7	0,6	1,5
Термоэдс, мВ/К (концентрация носителей, см ⁻³)	-300 (чистый)	-250 (1·10 ¹⁷)	-400 (чистый)	-680 (8·10 ¹⁴)	-600 (1·10 ¹⁶)	-1100 (1·10 ¹⁴)	-1600 (3·10 ¹⁴)

Кинетические свойства

Из всех соединений, входящих в класс $A^{III}B^{V}$, кинетические свойства антимонида индия изучены наиболее подробно. Одной из важнейших характеристик транспорта носителей заряда в InSb является высокое значение подвижности электронов проводимости μ_{e} . В недопированном InSb при комнатной температуре μ_e достигает рекордной величины в 7,7·10⁵ см²·B⁻¹·сек⁻¹. Подвижность электронов проводимости и дырок определяется механизмами рассеяния, наиболее важными из которых являются рассеяние на колебаниях решетки, примесях и друг на друге. Качественно зависимость μ_e от эффективной массы m_e и температуры T для каждого из механизмов рассеяния может быть представлена в следующем виде [13; 33]:

$$\mu_{\rm e} \sim \left(m_{\rm e}\right)^p T^q \tag{B.6}$$

Отрицательные значения показателя p в формуле (В.6) для основных механизмов рассеяния [33] и малая величина эффективной массы электронов проводимости определяют высокие значения μ_e в InSb. Для показателя степени q во всем температурном интервале справедливо неравенство $|q| \leq 3/2$ (исключением является экспоненциальная температурная зависимость μ_e при рассеянии на оптических фононах в области температур ниже температуры Дебая θ_D) [33].

Для подвижности электронов в области комнатных температур в [31] была приведена эмпирическая формула, хорошо описывающая экспериментальные данные:

$$\mu_{\rm e} = 77000 \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{-1.66} \, \rm{cm}^2 \cdot B^{-1} \cdot \rm{cek}^{-1} \tag{B.7}$$

Вследствие большой величины эффективной массы дырок по отношению к электронной, их подвижность в InSb на два порядка меньше подвижности электронов и при комнатной температуре не превышает значения 700 см²·B⁻¹·cek⁻¹ [36].

Формула [37]:

$$\mu_{\rm h} = 2,55 \cdot 10^7 \cdot T^{-1.81} \,\,{\rm cm}^2 \cdot {\rm B}^{-1} \cdot {\rm ce} {\rm \kappa}^{-1} \tag{B.8}$$

параметризует температурную зависимость подвижности дырок и удовлетворительно описывает экспериментальные данные в области температур выше 100 К. Проводимость σ и коэффициент Холла *R* в полупроводнике с двумя типами носителей определяются формулами [13] (т.к. в InSb концентрации «легких» дырок и дырок «отщепленной» зоны существенно меньше концентрации «тяжелых» дырок, данные формулы можно применить для качественного анализа проводимости и эффекта Холла в InSb):

$$R = \frac{1}{n_i ec} \frac{(1-b^2 a)}{(1+ba)^2},$$

$$\sigma = \mu_e en_i \frac{1+ba}{b\sqrt{a}},$$
(B.9)

где *a* и *b* – отношения концентраций и подвижностей электронов и дырок (в InSb b ~ 100), $n_i = \sqrt{n_e n_h}$, *c* – скорость света. В области примесной проводимости характер температурной зависимости σ и *R* существенным образом различается в образцах антимонида индия n- и p- типов. В n-InSb изза чрезвычайно малой энергии активации примесных атомов (Se, S, Te) ε_d ~ $7 \cdot 10^{-4}$ эВ [4] донорные уровни сливаются с зоной проводимости, и концентрация носителей заряда n_e в области примесной проводимости постоянна. Поэтому, согласно (В.9), коэффициент Холла $R^{-1} \sim n_e e$ и проводимость $\sigma \approx n_e e \mu_e$ в образцах n-типа практически не зависят от температуры. В p-InSb *R* и σ зависят от температуры во всем диапазоне примесной проводимости. Указанное отличие температурного поведения кристаллов p-типа объясняется величиной энергии ионизации ε_a примесных акцепторных атомов (Cd, Zn, Cu, Cr), которая почти на два порядка больше ε_d и составляет сотые доли эВ.

В области собственной проводимости (в формулах (В.9) $a = n_e/n_h \approx 1$) из-за большого различия подвижностей электронов и дырок коэффициенты *R* и σ определяются электронной составляющей, согласно (В.9):

$$R|_{a\approx 1} \approx \frac{1}{n_{e}ec},$$

$$\sigma|_{a\approx 1} \approx \mu_{e}en_{e},$$
(B.10)

Как следует из формулы (В.9), знак коэффициента Холла в образцах p-InSb меняется при концентрации дырок $n_{\rm h} = \left(\frac{\mu_{\rm e}}{\mu_{\rm h}}\right)^2 n_{\rm e}$, что наблюдается экспериментально (см., например [38]).

Порядок величины термоэдс *s* кристаллов антимонида индия такой же, как и у большинства соединений $A^{III}B^{V}$ [13; 31]. В области собственной проводимости *s* ~ 1/*T* и, за исключением области температур *T* < 100 K, не имеет каких-либо аномалий [4; 5]. Для качественного описания температурного поведения *s* можно воспользоваться формулой [33]:

$$s = -\frac{k_{\rm b}}{\sigma} \left[\left(A_{\rm e} + \frac{\eta}{k_{\rm b}T} \right) \mu_{\rm e} n_{\rm e} - \left(A_{\rm h} + \frac{\eta + \varepsilon_{\rm g}}{k_{\rm b}T} \right) \mu_{\rm h} n_{\rm h} \right], \qquad (B.11)$$

где $k_{\rm b}$ – постоянная Больцмана, η – химический потенциал носителей заряда, $\varepsilon_{\rm g}$ – ширина запрещенной зоны, $A_{\rm e}$ и $A_{\rm h}$ – коэффициенты, определяемые механизмами рассеяния. Как и у других соединений $A^{\rm III}B^{\rm V}$, термоэдс InSb достаточно сильно зависит от степени легирования [39]. Из формулы (B.11) видно, что в области примесной проводимости образцы n-типа, для которых $n_{\rm e} \gg n_{\rm h}$, обладают отрицательными значениями *s*, в то время как у p-InSb – *s* положительна.

В области собственной проводимости у InSb *s* отрицательна из-за большого отношения подвижностей электронов и дырок. В образцах p-InSb при изменении типа проводимости *s* меняет знак [40; 41; 42]. В допированных кристаллах n- и p-типа в температурной зависимости термоэдс при низких температурах были обнаружены [43; 44; 45] аномалии, объясненные эффектом увлечения носителей заряда фононами [43; 46].

Теплопроводность κ кристаллов InSb меньше чем у большинства полупроводниковых соединений типа $A^{III}B^{V}$. Величина и температурное поведение κ антимонида индия обусловлены, в первую очередь, теплопроводностью решетки. При низких температурах κ зависит от T немонотонно [44; 47] и определяется рассеянием фононов на примесях и границах образца. В области высоких температур $\kappa \sim 1/T$ и определяется

трех-фононными процессами рассеяния и, в меньшей степени, вкладом носителей заряда κ_e [48].

Моделирование кинетических свойств. Уравнение Больцмана

Традиционный подход к изучению транспортных свойств неравновесных систем основан на использовании феноменологического кинетического уравнения Больцмана, которое адекватно описывает кинетические явления для разреженного электронного газа в состояниях, не слишком удаленных от термодинамического равновесия [49; 50].

Помимо кинетического уравнения Больцмана для описания неравновесных процессов используется также теория линейного отклика (методы Кубо [51; 52] и неравновесного статистического оператора [52]), которая дает формулы для тензоров кинетических коэффициентов, не прибегая к непосредственному решению кинетического уравнения.

После появления диаграммных методов описания равновесных свойств квантовых систем (см., например, [53]) были приложены значительные усилия к разработке диаграммных подходов для вывода квантового кинетического уравнения. Для ряда специальных случаев Боголюбовым [54], Ван Ховом [55], Пригожиным и Ресибуа [56], Латтинжером и Коном [57], Кадановым и Беймом [58], а также Келдышем [59] в рамках различных формализмов были получены квантовые кинетические уравнения.

Не смотря на определенные успехи диаграммных методов, феноменологическое уравнение Больцмана продолжает использоваться для аналитического и численного моделирования транспортных свойств металлов и полупроводников.

Аналитическое решение уравнения Больцмана чаще всего находят в приближении времени релаксации (т-приближении) или используя

вариационный метод. Указанные подходы имеют ряд известных ограничений. Так, приближение времени релаксации [32; 33; 60], позволяет рассматривать задачу только для случаев, в которых анизотропией энергетического спектра и неупругостью рассеяния носителей зарядов можно пренебречь. Вариационный метод [61; 62] лишен вышеуказанных недостатков, однако, результат вычислений вариационным методом зависит от выбора пробной функции.

Альтернативой аналитическому рассмотрению являются численные методы решения уравнения Больцмана, которые в последнее время приобрели особую актуальность. Численное исследование кинетических свойств с помощью уравнения Больцмана позволяет не только качественно, но и количественно описывать результаты экспериментов по измерению кинетических коэффициентов. Возросшие вычислительные мощности и возможность использования параллельных вычислений позволяют включать в расчет сложные физические модели, которые с хорошей точностью, недоступной для аналитических методов, описывают физические свойства рассматриваемых соединений.

Ранее расчеты кинетических свойств InSb проводились как с использованием численных, так и с помощью аналитических методов. Так, например, в работе [8] кинетическое уравнение решалось с помощью вариационного метода. Для достижения согласия результатов расчетов с экспериментальными данными использовался подгоночный параметр – константа акустического деформационного потенциала *C*. Путем выбора оптимального значения *C* для температур T = 77 и 300 K были получены концентрационные зависимости подвижности μ_e и термоэдс *s* образцов п-InSb близкие к экспериментальным данным. Моделирования температурой зависимости μ_e и *s*, а также расчет других кинетических коэффициентов не проводились.

В работе [10] численно исследовались температурные и концентрационные зависимости подвижности μ_e и термоэдс *s* антимонида индия n-типа. Уравнение Больцмана решалось аналогично [63]. При расчете учитывалась непараболичность законов дисперсии электронов, а также основные механизмы рассеяния носителей заряда, за исключением рассеяния электронов на ионизованных атомах примесей. Для температур T > 200 К было получено хорошее согласие с экспериментальными данными, однако для температур T < 200 К наблюдалось существенное расхождение с экспериментом.

Другой группой авторов [9] численно моделировались температурная зависимость проводимости σ и постоянной Холла *R* образцов n-InSb. При исследовании согласие с экспериментальными данными достигалось путем подгонки констант акустического деформационного потенциала, эффективной массы «тяжелых» дырок, а также температурной зависимости ширины запрещенной зоны ε_{g} .

Во всех перечисленных выше работах рассматривались лишь отдельные вопросы кинетики антимонида индия, полной картины с высокой степенью детализации представлено не было.

Поэтому первой целью диссертации была разработка теоретической модели, которая на основе численного решения уравнения Больцмана позволяет проводить детальное рассмотрение транспортных свойств р-типа путем расчёта антимонида индия n-И температурных И концентрационных зависимостей кинетических коэффициентов, а также исследование влияние различных механизмов рассеяния на транспортные свойства.

Термоэлектрические свойства

информация о Детальная температурной и концентрационной зависимостях кинетических коэффициентов требуется и для оценки эффективности использования соединения в качестве термоэлектрического Вопрос о применении полупроводниковых материала. материалов в преобразователях термоэлектрических энергии активно обсуждается, начиная с 50-х годов прошлого века [3; 64; 65; 66]. Не смотря на определенные успехи в данной области, генераторы электрического тока и охлаждающие устройства с использованием термоэлектрических материалов не получили широкого распространения из-за невысокой эффективности. Термоэлектрические преобразователи энергии обладают рядом преимуществ по сравнению с традиционными: у них отсутствуют движущиеся и изнашивающиеся части, они экологически чисты, бесшумны в работе, обладают малым размером и весом. В основном они используются в таких областях, где их применение оправдано – в дальних космических полетах, радиоэлектронике, медицине, научном и лабораторном оборудовании [3; 64].

Эффективность полупроводникового материала при использовании его в качестве рабочего вещества для термоэлектрического преобразования энергии характеризуется коэффициентом термоэлектрической добротности («figure of merit») [66]:

$$Z = \frac{s^2 \sigma}{\kappa} \tag{B.12}$$

где s – термоэдс (коэффициент Зеебека), σ – электропроводность и κ – теплопроводность вещества. Область температур, в которой безразмерный коэффициент термоэлектрической добротности ZT (T – температура) у соединений и сплавов достигает максимальных значений, определяет эффективного условия использования данных материалов В термоэлектрических генераторах тока или в охлаждающих устройствах. Для коэффициента действия повышения полезного термоэлектрических

генераторов желательно иметь как можно большие значения *ZT* в максимально широком температурном интервале.

Для определения направления поиска новых, более эффективных термоэлектрических материалов представляется необходимым ответить на вопрос о том, какие свойства полупроводниковых соединений и сплавов определяют высокие значения *Z*. Данный вопрос активно обсуждался ранее (см., например, [65; 66]), однако при этом был сделан ряд упрощающих предположений, ограничивающих область применимости рекомендаций, содержащихся в указанных статьях.

Как было отмечено выше, InSb не обладает рекордными значениями ZT, но данные о температурных и концентрационных зависимостях кинетических коэффициентов InSb позволяют проанализировать вклад различных механизмов рассеяния носителей заряда в термоэлектрическую добротность и выявить те факторы, которые наиболее сильно влияют на величину ZT.

Тем самым, второй целью работы был поиск на примере InSb физических свойств полупроводниковых соединений, определяющих эффективность использования вещества в качестве термоэлектрического преобразователя энергии.

Для достижения поставленных в диссертации целей было необходимо решить следующие задачи:

 Разработать теоретическую схему и комплекс программ численного решения линеаризованного кинетического уравнения Больцмана для носителей заряда в присутствии электрического и магнитного полей, а также градиента температуры без применения упрощений, используемых в т-приближении и в вариационном методе. В качестве

метода численного решения уравнения Больцмана использовать итерационный подход.

- Адаптировать разработанный комплекс компьютерных программ для вычислений на высокопроизводительном кластере НИЦ «Курчатовский институт» с использованием распараллеливания программного кода.
- Провести расчеты температурных и концентрационных зависимостей кинетических коэффициентов InSb n- и p-типа (проводимости, теплопроводности, термоэдс и коэффициента Холла). Модель должна качественно и количественно описывать результаты экспериментов по измерению кинетических коэффициентов в широком диапазоне температур и концентраций донорных и акцепторных примесей.
- Проанализировать вклады различных механизмов рассеяния носителей заряда в температурные и концентрационные зависимости кинетических коэффициентов.
- На основе проведенного анализа выявить механизмы рассеяния носителей заряда и физические свойства, определяющие эффективность вещества при использовании его для термоэлектрического преобразования энергии.

На защиту выносятся следующие основные результаты и положения:

- Разработана теоретическая схема для моделирования транспортных свойств антимонида индия, основанная на численном решении кинетического уравнения Больцмана итерационном методом с учетом наблюдаемой экспериментально электронной структуры и детальным рассмотрением основных механизмов рассеяния носителей заряда.
- Создан комплекс программ для решения линеаризованного кинетического уравнения Больцмана и вычисления кинетических коэффициентов полупроводников, зарегистрированный в Федеральной службе по интеллектуальной собственности [67].

- С помощью разработанного комплекса программ получены температурные и концентрационные зависимости проводимости, термоэдс, коэффициента Холла антимонида индия, а также вклада электронной подсистемы в теплопроводность. Получено хорошее согласие результатов расчетов с имеющимися экспериментальными данными для кинетических коэффициентов InSb в широком диапазоне температур и концентраций донорных и акцепторных примесей. В частности, воспроизведены такие особенности кинетических свойств как: минимум температурной зависимости проводимости образцов *n*-InSb с относительно небольшими концентрациями допирующих атомов [38], смена знака термоэдс образцов p-InSb [42].
- Предложен метод анализа влияния вкладов от различных механизмов рассеяния носителей заряда на эффективность термоэлектрического Метод основан преобразования энергии. на последовательном исключении каждого ИЗ механизмов рассеяния расчете при термоэлектрической добротности. На основе предложенного метода проведено рассмотрение влияния основных механизмов рассеяния носителей заряда на термоэлектрическую добротность антимонида индия. Выявлена существенная роль механизма рассеяния носителей заряда полярными оптическими фононами в InSb.
- Предложено качественное объяснение высоких значений термоэлектрической добротности полупроводниковых соединений элементов IV и V групп PbTe, Bi₂Te₃, Sb₂Te₃, Bi_{2-x}Sb_xTe₃, Bi-Sb, основанное на предположении о подавлении механизма рассеяния носителей заряда на полярных оптических фононах в данных соединениях.
- Предложен критерий поиска новых эффективных термоэлектриков высокие значения термоэлектрической добротности могут наблюдаться

у полупроводниковых материалов, обладающих большими значениями диэлектрических констант.

Научная новизна:

- Впервые проведено систематическое исследование кинетических свойств антимонида индия n- и p- типа в широком диапазоне температур и концентраций допирующих атомов на основе численного решения кинетического уравнения Больцмана. При вычислениях кинетических коэффициентов использовался единый набор констант как в законах дисперсии так и в матричных элементах рассеяния носителей заряда.
- Впервые выполнен численный расчет вклада электронной подсистемы *к*е в теплопроводность InSb. Надежность найденных значений *ке* обусловлена адекватностью использованной модели, с помощью которой получено хорошее согласие результатов расчетов других кинетических коэффициентов с экспериментальными данными.
- Разработан метод, позволивший определить степень влияния каждого из механизмов рассеяния электронов и дырок на эффективность термоэлектрического преобразования энергии.
- Предложен критерий поиска новых эффективных термоэлектрических полупроводниковых материалов.

Практическая ценность диссертации:

 Разработанные автором теоретическая модель и комплекс программ решения линеаризованного уравнения Больцмана для носителей заряда и расчета транспортных свойств позволяют проводить реалистичные расчеты кинетических коэффициентов полупроводников.

- Дано объяснение высоких значений термоэлектрической добротности полупроводниковых соединений и сплавов тяжелых элементов IV и V групп PbTe, Bi₂Te₃, Sb₂Te₃, Bi_{2-x}Sb_xTe₃, Bi-Sb.
- Предложенный критерий поиска термоэлектриков может быть использован для поиска новых, более эффективных полупроводниковых термоэлектрических материалов.

Апробация работы и публикации. Основные результаты представляемой работы докладывались и обсуждались на следующих семинарах и конференциях:

- 1. 54-я научная конференция МФТИ, г. Долгопрудный, 2011 г.
- 2. 9-я Курчатовская молодежная школа, г. Москва, 2011 г.
- 3. 55-я научная конференция МФТИ, г. Долгопрудный, 2012 г.
- 4. 10-я Курчатовская молодежная школа, г. Москва, 2012 г.
- Конференция по достижениям в физике конденсированного состояния (Conference on Frontiers of Condensed Matter Physics), г. Триест, Италия, 2013 г.
- Семинар отделения теоретической физики Института общей и ядерной физики (ИОЯФ) Центра фундаментальных исследований НИЦ «Курчатовский институт», апрель 2014 г.

По теме диссертации было опубликованы в 2 статьи в реферируемых отечественных (1) и зарубежных (1) журналах. Получено 1 свидетельство о регистрации программ для ЭВМ.

Личный вклад автора в работах, составляющих основу диссертации, заключается в разработке теоретической модели и пакета программ «CCTS Solver» для решения линеаризованного кинетического уравнения Больцмана, получении результатов в рамках этой модели, сравнении их с экспериментальными данными, а также в активном участии в подготовке публикаций по итогам выполненных исследований. Автором выполнен весь объем численных расчетов, необходимых для исследования транспортных свойств антимонида индия и выявлены основные механизмы рассеяния носителей заряда, оказывающие наибольшее влияние на эффективность термоэлектрического преобразования энергии.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и двух приложений. Полный объем диссертации составляет 152 страницы с 33 рисунками и 3 таблицами. Список литературы содержит 169 наименования.

Глава 1. Уравнение Больцмана и метод его решения

Кинетическое уравнение Больцмана – интегро-дифференциальное уравнение, аналитическое решение которого чаще всего находят в приближении времени релаксации (т-приближении) ИЛИ используя вариационный метод. Как уже упоминалось, данные подходы имеют ряд ограничений [32; 33; 60]. Решение кинетического уравнения с помощью указанных методов с учетом анизотропии энергетического спектра И неупругости рассеяния носителей зарядов затруднено.

Альтернативой аналитическому рассмотрению являются численные методы решения уравнения Больцмана, которые используются в подавляющем большинстве работ по расчету кинетических коэффициентов. Численные методы достаточно трудоемки в реализации, но в отличие от аналитических методов, они позволяют учитывать как особенности электронной структуры вещества, так и различные механизмы неупругого рассеяния электронов и дырок в полупроводниках.

В настоящее время для численного решения задач электронного транспорта широко используется метод Монте-Карло, который позволяет рассматривать реальные энергетические спектры носителей заряда и учитывать экспериментально полученные дисперсионные кривые фононов [68; 69; 70]. Данный метод достаточно громоздок, и даже при современных вычислительных мощностях, является времязатратным.

Другим вариантом численного подхода к решению кинетического уравнения являются методы непосредственного решения интегродифференциальных уравнений.

В работах [71; 72; 73] предложены численные схемы, при реализации которых фазовое пространство разбивается на ячейки, в каждой из которых

искомая функция распределения представляется в виде линейной комбинации базисных функций (система базисных функций чаще всего выбирается в виде ортогональных полиномов). Коэффициенты разложения находятся стандартными численными методами из системы линейных дифференциальных уравнений, которая получена из уравнения Больцмана с помощью метода взвешенных невязок.

Подходы, упомянутые выше, позволяют рассматривать широкий класс задач, однако, ограничением данных подходов является невозможность рассмотрения вырожденных полупроводников.

Следует также отметить еще несколько алгоритмов численного решения кинетического уравнения: приближение матрицы рассеяния [74], прямой матричный метод [75], основанный на полной дискретизации фазового пространства и сведения уравнения Больцмана к системе линейных уравнений, различные итерационные методы. В работе [76] итерационно уравнение, полученное решается функциональное ИЗ кинетического уравнения [77]. Такой подход позволяет рассматривать рассеяние только на оптических фононах с независящей от волнового вектора частотой, рассеяния носителей [76] остальные механизмы заряда авторы рассматривают в приближении времени релаксации, ограничения которого были упомянуты выше.

В [78] предложен другой итерационный подход к решению кинетического уравнения. Уравнение Больцмана позволяет ввести оператор дифференцирования по времени, что, в свою очередь, дает возможность, используя разложение в ряд Тэйлора в начальный момент времени (в качестве начального распределения используется равновесное распределение Больцмана), определить искомую функцию в любой последующий, не слишком отдаленный момент. Помимо нестационарного решения, указанный подход позволяет так же найти стационарную функцию распределения.

В настоящей работе кинетическое уравнение для носителей заряда в полупроводнике [32; 33] решалось итерационно, аналогично [63]. Рассматривался линеаризованный вариант уравнения Больцмана для нескольких типов носителей заряда в InSb с законами дисперсии, полученными с помощью модели Кейна (см. параграф 1 второй главы). Механизмы рассеяния носителей заряда и входящие в них параметры приведены в параграфе 2 второй главы.

Уравнение Больцмана для *i*-го сорта носителей заряда в полупроводнике можно записать следующим образом [33]:

$$\frac{df^{(i)}(\mathbf{k})}{dt} = \int \left\{ f^{(i)}(\mathbf{k}') \left[1 - f^{(i)}(\mathbf{k}) \right] W_{ii}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f^{(i)}(\mathbf{k}) \left[1 - f^{(i)}(\mathbf{k}') \right] W_{ii}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right\} d\mathbf{k}' + \sum_{j \neq i} \int \left\{ f^{(j)}(\mathbf{k}') \left[1 - f^{(i)}(\mathbf{k}) \right] W_{ji}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - f^{(i)}(\mathbf{k}) \left[1 - f^{(j)}(\mathbf{k}') \right] W_{ij}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) \right\} d\mathbf{k}'$$
(1.1)

здесь $f^{(i)}(\mathbf{k}) - функция распределения$ *i*-го сорта носителей (электронов или дырок),**k** $- волновой вектор. <math>W_{ji}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ – вероятность перехода из состояния с волновым вектором **k** в состояние с вектором **k'**. (при $i \neq j$ функция $W_{ji}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ описывает межзонный переход, в противном случае внутризонный).

Первое слагаемое в правой части (1.1) отвечает внутризонным переходам, второе – межзонным. В InSb межзонные переходы могут происходить между зонами «легких» и «тяжелых» дырок вследствие вырожденности валентной зоны в Г точке [33]. Поэтому, второе слагаемое в (1.1) важно при моделировании транспортных свойств p-InSb.

Вероятности перехода $W_{\mu}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ в уравнении (1.1) не учитывают рассеяние носителей зарядов одного сорта друг на друге. Данный факт обусловлен тем, что указанный механизм рассеяния не оказывает существенного влияния на кинетические свойства в рассматриваемых в диссертации интервалах температур и концентраций [79].

При написании кинетического уравнения нами было рассмотрено три случая, соответствующих различным постановкам эксперимента:

- теплоизолированный образец находится во внешнем электрическом поле
- к электроизолированному образцу приложен градиент температуры
- теплоизолированный образец находится в магнитном и электрическом полях

Схемы решения уравнения Больцмана в первых двух случаях похожи между собой и позволяют вычислить основные кинетические коэффициенты: проводимость σ , вклад электронной подсистемы κ_e в теплопроводность κ и коэффициент Зеебека *s*. Поэтому их рассмотрение объединено в одном параграфе. Третий случай позволяет вычислить кинетические коэффициенты в присутствии магнитного поля, метод решения отличается от первых двух случаев и рассматривается в отдельном параграфе. Ниже приведены подробные схемы решения уравнения Больцмана для всех указанных случаев.

1.1 Явления переноса в отсутствии магнитного поля

В параграфе рассмотрен метод нахождения решения уравнения Больцмана для случаев, в которых к полупроводнику приложены внешнее электрическое поле или градиент температуры, также приведены выражения для вычисления основных кинетических коэффициентов.

1.1.1 Метод решения уравнения Больцмана

В модели Кейна зонной структуры InSb возникают четыре типа свободных носителей заряда: электроны проводимости, «легкие» и

«тяжелые» дырки, зона «отщепленных» дырок, которая, вследствие малой заселенности, не оказывает влияние на кинетические свойства, и не включена в расчет (подробнее о зонной структуре см. параграф 1 второй главы).

Для описания электронов нами использовалась статистика Ферми. Для описания дырок, согласно [32; 33], удобно ввести обозначения:

$$\eta_{\rm h} = -\varepsilon_{\rm g} - \eta \tag{1.2}$$

$$\varepsilon_{\rm h} = -\varepsilon_{\rm g} - \varepsilon \tag{1.3}$$

где $\varepsilon_{\rm g}$ – ширина запрещенной зоны, η – химический потенциал, а ε – энергия носителей заряда.

В этих обозначениях равновесная функция распределения дырок принимает стандартный вид распределения Ферми [32], а поправка к равновесной функции распределения дырок имеет вид аналогичный электронной. Поэтому ниже рассмотрение решения кинетического уравнения проведено для электронов проводимости, а формулы для дырок можно получить указанным выше способом.

При наличии в образце электрического поля E и градиента температуры ∇T (для определенности, не нарушая общности, считаем их сонаправленными), левая часть линеаризованного кинетического уравнения для электронов проводимости представима в виде:

$$\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos \theta \left[(eE - \nabla \eta) - (\varepsilon - \eta) \frac{\nabla T}{T} \right]$$
(1.4)

где f_0 – равновесная функция распределения электронов, θ – угол между волновым вектором **k** и электрическим полем (или градиентом температуры), $\mathbf{v} = \hbar^{-1} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}}$ и e – скорость и заряд носителя, T – температура.

Химический потенциал *η* находится из условия нейтральности [32; 33]:

$$n_{\rm e} + n_{\rm a} = n_{\rm hl} + n_{\rm hh} + n_{\rm d}$$
 (1.5)

где $n_{\rm e}$, $n_{\rm hl}$, $n_{\rm hh}$ — концентрации электронов проводимости, «легких» и «тяжелых» дырок соответственно, а $n_{\rm a}$ и $n_{\rm d}$ — концентрации электронов на акцепторных уровнях и свободных состояний на донорных уровнях.

В случае простой одновалентной примеси, согласно [32; 33]:

$$n_{\rm d} = N_{\rm d} \left[1 + 2e^{(\varepsilon_{\rm d} + \eta)/k_{\rm b}T} \right]^{-1}$$
(1.6)

$$n_{\rm a} = N_{\rm a} \left[1 + 2e^{-(\varepsilon_{\rm a} + \eta)/k_{\rm B}T} \right]^{-1}$$
(1.7)

В формулах (1.6), (1.7) под величинами ε_d и ε_a следует понимать значения энергии ионизации донорных и акцепторных примесей, а под N_d и N_a – концентрации донорных и акцепторных атомов в рассматриваемом образце.

С учетом того, что все члены формулы (1.5) зависят от химического потенциала, выражение (1.5) – трансцендентное уравнение, которое позволяет найти энергию Ферми. В общем случае, уравнение не имеет аналитического решения, поэтому оно решалось численно (для решения использовался метод Брента [80]).

Поправка $\delta f = f(\mathbf{k}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ к равновесной фермиевской функции распределения электронов f_0 ищется пропорциональной левой части (1.4) уравнения Больцмана (1.1) [60; 62]:

$$\delta f_E \cos \theta (eE - \nabla \eta) + \delta f_T \cos \theta \cdot \nabla T =$$

$$= \frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos \theta \left(\phi_1^{(1)}(k) (eE - \nabla \eta) + \phi_2^{(1)}(k) (\varepsilon - \eta) \frac{\nabla T}{T} \right)$$
(1.8)

Функции δf_E и δf_T определяют поправки к f_0 , возникающие в результате воздействия на полупроводник электрического поля и градиента температуры соответственно. Функции $\phi_1^{(1)}(\mathbf{k})$ и $\phi_2^{(1)}(\mathbf{k})$, определяющие зависимость поправок δf_E и δf_T от волнового вектора, находятся численно из линеаризованного кинетического уравнения (1.1). Используя формулы (1.1), (1.4) и (1.8), линеаризованное уравнение Больцмана для функций $\phi_1(k)$ и $\phi_2(k)$ можно разбить на два независимых уравнения (слагаемые пропорциональные ($e\mathbf{E} - \nabla \eta$) и ∇T) и переписать их в форме, похожей на интегральное уравнение Фредгольма второго рода:

$$\phi_{1}^{(i)}(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{j} \int \phi_{1}^{(j)}(\mathbf{k}') \frac{\partial f_{0}^{(j)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos(\theta') F_{ij}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos\theta}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos(\theta) \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}',\mathbf{k},\varepsilon') dk'}$$
(1.9)

$$\phi_{2}^{(i)}(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{j} \int \phi_{2}^{(j)}(\mathbf{k}') \frac{\partial f_{0}^{(j)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos(\theta') \Big[\varepsilon'^{(j)} - \eta \Big] F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos(\theta) \Big[\varepsilon^{(i)} - \eta \Big] \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}'} - \frac{1}{\sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}'} (1.10)$$

Введенная для сокращения записи формул (1.9) и (1.10) функция $F_{ij}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\varepsilon)$ определяется через вероятности перехода $W_{ij}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$:

$$F_{ij}\left(\mathbf{k},\mathbf{k}',\varepsilon\right) = W_{ji}\left(\mathbf{k},\mathbf{k}'\right)\left(1 - f_{0}^{(i)}\left(\varepsilon\right)\right) + f_{0}^{(i)}\left(\varepsilon\right)W_{ij}\left(\mathbf{k}',\mathbf{k}\right)$$
(1.11)

индекс i = 1, 2, 3 подразумевает три сорта носителей (электроны, «легкие» и «тяжелые» дырки, соответственно). Подробное рассмотрение вероятностей перехода $W_{ij}(\mathbf{k}',\mathbf{k})$ для различных механизмов рассеяния носителей заряда приведено во втором параграфе второй главы.

Учитывая, что в рассматриваемом приближении зонная структура InSb изотропна, а также тот факт, что функция $W(\mathbf{k}', \mathbf{k})$, определяющая вероятность перехода носителей заряда при рассеянии, зависит только от модуля волновых векторов \mathbf{k}' и \mathbf{k} и косинуса угла между ними [81], можно показать, что функции $\phi_2^{(i)}(\mathbf{k})$ и $\phi_1^{(i)}(\mathbf{k})$ в уравнениях (1.9), (1.10) являются одномерными и зависят только от $|\mathbf{k}|$ (подробнее см. в Приложение 1). С учетом выше сказанного, для уравнений (1.9) и (1.10) было получено:

$$\phi_{1}^{(i)}(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{j} \int \phi_{1}^{(j)}(\mathbf{k}') \frac{\partial f_{0}^{(j)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos(\theta') F_{ij}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}',\mathbf{k},\varepsilon') dk'}$$
(1.12)
$$\phi_{2}^{(i)}(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{j} \int \phi_{2}^{(j)}(\mathbf{k}') \frac{\partial f_{0}^{(j)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos(\theta') [\varepsilon'^{(j)} - \eta] F_{ij}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v [\varepsilon^{(i)} - \eta] \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}',\mathbf{k},\varepsilon') d\mathbf{k}'} - \frac{1}{\sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}',\mathbf{k},\varepsilon') d\mathbf{k}'} (1.13)$$

Следует отметить, что в случае, когда межзонные переходы несущественны (данное условие с хорошей точностью выполняется для *n*-InSb), уравнения (1.12), (1.13) упрощаются и приводятся к виду [82]:

$$\phi_{1}^{(i)}(k) = \frac{\int \phi_{1}^{(i)}(k') \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon'} v' \cos \theta' \cdot W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) d\mathbf{k}' - \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v}{\int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cdot W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d\mathbf{k}'}$$
(1.14)

$$\phi_{2}^{(i)}(k) = \frac{\int \phi_{2}^{(i)}(k') \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon'} v' \cos \theta' [\varepsilon' - \eta] W(\mathbf{k}', \mathbf{k}) d\mathbf{k}' - \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} [\varepsilon - \mu] v}{\int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} [\varepsilon - \eta] v \cdot W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d\mathbf{k}'}$$
(1.15)

При достаточно низких температурах, в случае приложения к образцу градиента температуры, становится существенным отклонение распределения фононов от равновесного и следует учитывать увлечение носителей заряда фононами [33]. Т.к. моделирование динамики решетки выходит за рамки диссертации, при наличии ∇T область температур T < 100 К не рассматривалась, а фононы при T > 100 К считались равновесными.

Для решения полученных уравнений (1.12), (1.13) использовался итерационный метод последовательных подстановок Лиувилля-Неймана [83]. Выполненная отдельно проверка показала, что решение данных уравнений указанным методом не зависит от вида начальной функции. Поэтому в качестве начальных функций брались нулевые функции. Точность рассматриваемого численного метода обсуждается в параграфе 1.3.

1.1.2 Вычисление кинетических коэффициентов

InSb имеет кубическую кристаллическую решетку (пространственная группа T_d^2 или $F\overline{4}3m$), вследствие чего кинетические коэффициенты – проводимость σ , подвижности μ_i , теплопроводность κ и термоэдс s в отсутствие магнитного поля являются скалярами. Проводимость вычисляется следующим образом [82]:

$$\sigma = \sum_{i} \sigma_{i} = \frac{e^{2}}{\left(2\pi\right)^{3}} \sum_{i} \int v^{2} \phi_{1}^{(i)}(k) \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cos^{2} \theta d\mathbf{k}$$
(1.16)

где σ_i – парциальные вклады носителей заряда в проводимость, а $\phi_i^{(i)}(k)$ – решение уравнения (1.12).

Подвижность *i*-го сорта носителей определяется через их концентрацию N_i и парциальный вклад σ_i в проводимость:

$$\mu_i = \frac{\sigma_i}{eN_i} \tag{1.17}$$

При нахождении термоэдс *s* и вклада электронной подсистемы κ_e в теплопроводность κ следует учесть условие отсутствия протекания электрического тока через образец. Данное условие позволяет выразить $\nabla \eta$ через ∇T :

$$\nabla \eta = -\nabla \eta_{\rm h} = \gamma \nabla T/T \tag{1.18}$$

В (1.18) введено обозначение:

$$\gamma = \frac{\sum_{i} e_{i} \int \phi_{2}^{(i)}(k) \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^{2} \cos^{2} \theta(\varepsilon - \eta) d\mathbf{k}}{\sum_{i} (\pm) e_{i} \int \phi_{1}^{(i)}(k) \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^{2} \cos^{2} \theta \cdot d\mathbf{k}}$$
(1.19)

В (1.19) и далее верхний знак в знаменателе относится к электронам, нижний к дыркам. С учетом (1.18) и (1.19), выражение для *к*_e имеет следующий вид:

$$\kappa_{\rm e} = -\frac{1}{\left(2\pi\right)^3} \frac{1}{T} \sum_{i} \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cos^2 \theta \cdot v^2 (\varepsilon - \eta) \Big[\phi_2^{(i)}(k) (\varepsilon - \eta) \mp \gamma \phi_1^{(i)}(k) \Big] d\mathbf{k} \qquad (1.20)$$

Исходя из феноменологического выражения для электрического тока в отсутствие электрического поля [84]:

$$\mathbf{J} = \frac{\sigma}{e} \nabla \eta + \sigma s \nabla T \tag{1.21}$$

в вычисляемом с помощью выражения аналогичного (1.16) **J** можно выделить слагаемое пропорциональное ∇T , которое является произведением проводимости и коэффициента термоэдс.

Тем самым, термоэдс *s* можно представить в виде [82]:

$$s = \frac{1}{\sigma T} \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{i} e_i \int v^2 (\varepsilon - \eta) \phi_2^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \cos^2 \theta \cdot d\mathbf{k}$$
(1.22)

1.2 Явления переноса в присутствии магнитного поля

Метод решения кинетического уравнения, приведенный в предыдущем параграфе, не применим к случаю нахождения полупроводника в постоянном магнитном поле. В настоящем параграфе рассмотрен метод, позволяющий находить решение уравнения Больцмана в присутствии магнитного поля, а также приведены выражения для коэффициента Холла и холловской подвижности носителей заряда.

1.2.1 Метод решения уравнения Больцмана

При наличии в образце магнитного и электрического полей **В** и **E**, левая часть линеаризованного уравнения Больцмана для *i*-го сорта носителей (1.1) принимает вид:

$$\frac{e}{\hbar} \frac{df_0^{(i)}}{d\varepsilon} \mathbf{v} \mathbf{E} + \frac{e}{\hbar c} \frac{d\left(\boldsymbol{\chi}^{(i)} \cdot \mathbf{E}\right)}{dk} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]$$
(1.23)

В выражении (1.23) введена неизвестная вектор-функция $\chi^{(i)}(\mathbf{k})$, характеризующая отклонение функции распределения от равновесной функции $f_0^{(i)}$:

$$\delta f^{(i)} = f^{(i)} - f_0^{(i)} = \boldsymbol{\chi}^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B})\mathbf{E}$$
(1.24)

В (1.24) и далее предполагается, что магнитное поле направлено по оси *z*.

Согласно [62; 76], удобно вместо функции $\chi^{(i)}(\mathbf{k})$] ввести функции $P_1^{(i)}, P_2^{(i)}, P_3^{(i)}$:

$$\boldsymbol{\chi}^{(i)}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \chi_1^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \\ \chi_2^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \\ \chi_3^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \end{pmatrix} = \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \begin{pmatrix} P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \theta \cos \varphi - P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \theta \sin \varphi \\ P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \theta \sin \varphi + P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \theta \cos \varphi \\ P_3^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \theta \end{pmatrix}$$
(1.25)

Ниже будет показано, что приведенное выше переобозначение существенно упрощает решение кинетического уравнения: вместо неизвестной трехмерной вектор функции $\chi^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B})$ рассматриваются три одномерные скалярные функции $P_{j}^{(i)}$. В приведенных обозначениях уравнение (1.1) можно переписать в виде системы уравнений (каждое уравнение системы (1.26) – (1.28) коэффициенты при соответствующей проекции вектора **E** на оси *x*, *y*, *z*):

$$\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} \chi_{2}^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) + \chi_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = \\ = \left(\sum_{j} \int \chi_{1}^{(j)}(\mathbf{k}', \mathbf{B}) F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \sin \theta \cos \varphi \right)$$

$$- \frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} \chi_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, \mathbf{B}) + \chi_{2}^{(i)}(\mathbf{k}) \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = \\ = \left(\sum_{j} \int \chi_{2}^{(j)}(\mathbf{k}', \mathbf{B}) F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \sin \theta \sin \varphi \right)$$

$$(1.27)$$
$$\chi_{3}^{(i)}(\mathbf{k},\mathbf{B}) = \frac{\sum_{j} \int \chi_{3}^{(j)}(\mathbf{k}',\mathbf{B}) F_{ij}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos\theta}{\sum_{j} \int F_{ij}(\mathbf{k}',\mathbf{k},\varepsilon') d\mathbf{k}'}, \qquad (1.28)$$

где тензор *F_{ij}* определен в первом параграфе текущей главы.

В Приложении 2 показано, что функции $P_j^{(i)}(\mathbf{k})$ зависят только от модуля волнового вектора. После преобразований, приведенных в Приложении 2, окончательно получим:

$$\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \left[\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, B) - P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' \right] = (1.29)$$

$$= -\sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'$$

$$\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \left[\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}, B) + \frac{e}{\hbar} + P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' \right] = (1.30)$$

$$= \sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'$$

$$P_{3}^{(i)}(\mathbf{k}, B) = \frac{\sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_{3}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \sum_{i} \int F_{ij}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}'$$

$$(1.31)$$

Следует отметить, что третье уравнение системы (1.29) – (1.31) идентично уравнению (1.12). Данный факт обусловлен отсутствием влияния магнитного поля на электронный транспорт в направлении приложенного магнитного поля. Кроме того, если в первых двух уравнениях системы (1.29) – (1.31) положить $\mathbf{B} = 0$, то из уравнения (1.29) следует, что $P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) = 0$, а уравнение (1.30) преобразуется к уравнению идентичному третьему. Этот факт объясняется изотропностью тензора проводимости в полупроводниках типа InSb в отсутствии магнитного поля.

Для численного решения полученных выше уравнений, аналогично случаю с **B** = 0, использовался метод последовательных подстановок Лиувилля-Неймана [83].

1.2.2 Вычисление кинетических коэффициентов

Решение системы (1.29) – (1.31) позволяет вычислить кинетические коэффициенты в присутствии магнитного поля. В этом случае проводимость является тензором, компоненты которого определяются следующей формулой [76]:

$$\sigma_{ij} = \frac{2e}{\left(2\pi\right)^3} \sum_{k} \int v_i \cdot \chi_j^{(k)} d\mathbf{k}$$
(1.32)

Для каждой из компонент тензора σ_{ij} :

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \sum_{k} \int P_1^{(k)}(k) \frac{\partial f_0^{(k)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi dk$$
(1.33)

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \sum_{k} \int P_2^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \sin^2 \theta \cos^2 \varphi dk$$
(1.34)

$$\sigma_{zz} = \frac{2e}{(2\pi)^3} \sum_{k} \int P_3^{(i)}(k) \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v^2 \cos^2 \theta dk$$
(1.35)

Для вычисления постоянной Холла R_{H} , множителя Холла r_{H} и холловской подвижности μ_{H} мы воспользовались выражениями (1.33) – (1.35) [33; 76]:

$$R = \frac{\sigma_{xy}}{B(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2)} = \frac{r_{\rm H}}{nec}$$
(1.36)

$$\mu^{\rm H} = R\sigma_{zz} \tag{1.37}$$

$$r_{\rm H} = \frac{\mu^{\rm H}}{\mu} = necR \tag{1.38}$$

1.3 Комплекс программ CCTS Solver

На основе описанных выше методов решения кинетического уравнения Больцмана был разработан комплекс программ «CCTS Solver» [67] (Charge Carriers Transport in Semiconductors Solver), позволяющий моделировать явления переноса в полупроводниковых соединениях с изотропной зонной структурой в широком диапазоне температур и концентраций донорных и акцепторных примесей в присутствии внешнего магнитного поля.

Следствием включения в расчет неупругости и анизотропии рассеяния носителей заряда, реалистичных моделей зонной структуры и фононных спектров рассматриваемого полупроводника являются большие времена вычисления. Для данной проблемы было решения использовано распараллеливание программного кода, позволяющее запускать разработанную программу в многопроцессорном режиме, что в свою очередь существенным образом уменьшает время, необходимое для вычислений.

Все расчеты для антимонида индия с помощью комплекса программ «CCTS Solver» выполнялась на Многоцелевом вычислительном комплексе (MBK) Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» [85].

Для оценки погрешности расчетов использовалось выражение, характеризующее разницу максимальных значений вычисляемой функции двух последовательных итераций:

$$\delta = \frac{\left| \max_{k} \left(\phi_{j}^{(i)}(k) \right|_{N=k+1} - \phi_{j}^{(i)}(k) \right|_{N=k} \right)}{\max_{k} \left(\phi_{j}^{(i)}(k) \right|_{N=k+1} \right)}$$
(1.39)

где *N* – номер итерации.

Проведенная проверка показала, что реализованный в «CCTS Solver» итерационный метод, является сходящимся, т.е. при достижении определенного номера N итерации $\delta = 0$ (с машинной точностью).

При расчете кинетических коэффициентов мы ограничились точностью $\delta = 10^{-5}$, что приводит к погрешности в вычислении кинетических коэффициентов менее 0.01%.

Как упоминалось во введении, антимонид индия является прямозонным полупроводником, кроме того, минимум энергии носителей заряда в InSb расположен в центре зоны Бриллюэна. Данное свойство упростило численный расчет: при вычислении кинетических коэффициентов (1.16), (1.20), (1.22) и (1.36) – (1.38) интегрирование велось по части зоны Бриллюэна, в которой отклонение функции распределения носителей заряда от равновесной (1.8) удовлетворяет условию:

$$\frac{\left|\Delta f(k)\right|}{\max_{k}\left|\Delta f(k)\right|} > 10^{-5} \tag{1.40}$$

Проверка показала, что область интегрирования — шар с центром в зоне Бриллюэна, поверхность которого значительно удалена от границ зоны. Использование при интегрировании данного условия приводит к погрешности в вычислении σ , κ_e , *s*, *R* не более 0.01 %.

Рис. 1 и 2 иллюстрируют сказанное выше. На них приведены зависимости отклонений функции распределения электронов δf_E и δf_T от равновесной функции для недопированного InSb, определенные в формуле (1.8), для двух температур T = 300 K и T = 700 K как функция обезразмеренного волнового вектора (\mathbf{k}_{max} – величина волнового вектора электрона на границе зоны Бриллюэна). Видно, что при удалении от центра зоны Бриллюэна рассматриваемые функции быстро убывают, и использование условия (1.40) оправдано в полной мере.

40



Рис. 1. Зависимость функции δf_E от модуля приведенного волнового вектора, характеризующей отклонение от равновесной функции в присутствии внешнего электрического поля. Сплошная линия – T = 300 K, пунктирная – T = 700 K.



Рис. 2. Зависимость функции δf_T от модуля приведенного волнового вектора, характеризующей отклонение от равновесной функции в присутствии градиента температуры. Сплошная линия – T = 300 K, пунктирная – T = 700 K.

Глава 2. Зонная структура и механизмы рассеяния носителей заряда в InSb

В данной главе обсуждаются параметры, используемые при моделировании температурной и концентрационной зависимостей кинетических коэффициентов антимонида индия. Рассматриваются зонная структура InSb и механизмы рассеяния носителей заряда, так же приводятся экспериментальные данные, используемые при описании указанных выше физических свойств кристаллов InSb.

2.1 Зонная структура и волновые функции носителей заряда

Для описания зонной структуры InSb использовалось изотропное приближение модели Кейна [32; 33; 35; 86], учитывающее спин-орбитальное взаимодействие, которое играет существенную роль в соединениях с кристаллической структурой типа цинковой обманки. При этом в модели зонной структуры возникают четыре вида свободных носителей заряда: электроны проводимости, «легкие» и «тяжелые» дырки, а также зона «отщепленных» дырок. Законы дисперсии электронов проводимости, «легких» дырок и дырок «отщепленной» зоны находятся с помощью формулы [86]:

$$\varepsilon = \varepsilon' + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^0} \left(1 + a^2 A' + b^2 M + c^2 L' + \frac{1}{5} \left[b^2 - 2c^2 \right] \cdot \left[L' - M - N' \right] \right)$$
(2.1)

где m_e^0 - масса свободного электрона, коэффициенты *a*, *b*, *c* определяют вклады базисных волновых функций *s*- и *p*-типа в собственные функции электронов проводимости и дырок:

$$a^{2} = \frac{1}{D} \left(\Delta + 3/2\varepsilon' \right) \left(\Delta + \varepsilon' \right) \varepsilon', \ b^{2} = \frac{\Delta^{2}}{3D} \left(\varepsilon' - \varepsilon_{g} \right), \ c^{2} = \frac{2}{3D} \left(\Delta + 3/2\varepsilon' \right)^{2} \left(\varepsilon' - \varepsilon_{g} \right)$$
(2.2)

Безразмерные константы *A'*, *M*, *L'*, *N'* учитывают по теории возмущений влияние базисных функций *d*- и *f*-типа. ε' - решение кубического уравнения:

$$\varepsilon'(\varepsilon' + \varepsilon_{g})(\varepsilon' + \varepsilon_{g} + \Delta) - k^{2}p^{2}\left(\varepsilon' + \varepsilon_{g} + \frac{2}{3}\Delta\right) = 0, \qquad (2.3)$$

где $\varepsilon_{\rm g}$ – ширина запрещенной зоны, Δ – величина спин-орбитального расщепления валентных зон, p – матричный элемент оператора импульса по базисным функциям *s*- и *p*-типа, D – множитель для коэффициентов *a*, *b*, *c* (находится из условия $a^2 + b^2 + c^2 = 1$). Зона «тяжелых» дырок, согласно изотропному приближению модели Кейна, имеет квадратичных закон дисперсии:

$$\varepsilon_{\rm hh} = -\varepsilon_{\rm g} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\rm e}^0} \left(1 + M + \frac{1}{5} \left[L' - M - N' \right] \right)$$
(2.4)

При вычислении вероятностей перехода в результате рассеяния носителей заряда, использовались волновые функции электронов и дырок, которые определяются блоховскими множителями [33; 86]:

$$\psi_{\mathbf{k},j} = \left(\frac{1}{V}\right)^{\frac{1}{2}} u_{\mathbf{k},j}\left(\mathbf{r}\right) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$
(2.5)

здесь j – проекция полного углового момента на ось z, V – объем кристалла, $u_{\mathbf{k},j}(\mathbf{r})$ - блоховский множитель.

В модели Кейна блоховские множители для электронов проводимости и «легких» дырок, согласно [33; 86; 87], имеют следующий вид:

$$u_{k,1/2} = \left(iaS - \frac{b - c\sqrt{2}}{2}\frac{k_{+}}{k}R_{-} + \frac{b + c\sqrt{2}}{2}\frac{k_{-}}{k}R_{+} + c\frac{k_{z}}{k}Z\right) \uparrow -b\left(\frac{k_{z}}{k}R_{+} - \frac{k_{+}}{k}\frac{Z}{\sqrt{2}}\right) \downarrow$$

$$u_{k,-1/2} = \left(iaS + \frac{b + c\sqrt{2}}{2}\frac{k_{+}}{k}R_{-} - \frac{b - c\sqrt{2}}{2}\frac{k_{-}}{k}R_{+} + c\frac{k_{z}}{k}Z\right) \downarrow + b\left(\frac{k_{z}}{k}R_{-} - \frac{k_{-}}{k}\frac{Z}{\sqrt{2}}\right) \uparrow$$
(2.6)

В (2.6) введены обозначения: $R_{\pm} = (X \pm iY)/\sqrt{2}$, стрелки \uparrow,\downarrow указывают на направление спина, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, k_x , k_y , k_z – проекции волнового вектора k на

соответствующие оси координат, *S*, *X*, *Y*, *Z* – волновые функции *s*- и *p*-типа, коэффициенты *a*, *b*, *c* – определены выше.

Для «тяжелых» дырок, соответственно [86]:

$$u_{k,3/2} = \left(\frac{1}{2}\frac{k_{+}}{k}\delta \cdot R_{-} - \frac{1}{2}\frac{k_{-}}{k}\delta^{-1}R_{+} + \sqrt{2}\frac{k_{z}}{k}\delta \cdot Z\right)\uparrow + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{k_{+}}{k}\delta \cdot Z - \frac{k_{z}}{k}\delta \cdot R_{+}\right)\downarrow$$

$$u_{k,-3/2} = \left(\frac{1}{2}\frac{k_{-}}{k}\delta \cdot R_{+} - \frac{1}{2}\frac{k_{+}}{k}\delta^{-1}R_{-} + \sqrt{2}\frac{k_{z}}{k}\delta \cdot Z\right)\downarrow + \left(\frac{k_{z}}{k}\delta \cdot R_{-} - \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{k_{-}}{k}\delta \cdot Z\right)\uparrow$$

$$(2.7)$$

В формуле (2.7) коэффициент δ определяется равенством:

$$\delta = \sqrt{\frac{k^2 - k_z^2}{k^2 + 3k_z^2}} = \frac{\sin\theta_k}{\sqrt{1 + 3\cos^2\theta_k}}$$
(2.8)

где θ_k – зенитный угол вектора **k**.

Следует так же отметить, что в InSb ширина запрещенной зоны ε_{g} существенно зависит от температуры. Изменение ε_{g} при постоянном давлении, согласно [88]:

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_{g}}{\partial T}\right)_{P} = \left(\frac{\partial \varepsilon_{g}}{\partial T}\right)_{V} + \left[V\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_{T}\right] \left[\frac{1}{V}\left(\frac{\partial V}{\partial T}\right)_{P}\right] \left(\frac{\partial \varepsilon_{g}}{\partial P}\right)_{T}$$
(2.9)

Первый член в (2.9) отвечает за изменение за счет взаимодействия электронов с фононами, второй – объемному температурному расширению. В [89] было показано, что электрон-фононное взаимодействие практически не оказывает влияния на величины эффективных масс носителей заряда. Поэтому в модели Кейна (2.1) – (2.4) была использована величина ширины запрещенной зоны без учета электрон-фононного взаимодействия [89].

В работе [90] показано, что величина *p*, входящая в уравнение (2.3), слабо зависит от температуры. Данная величина была параметризована с помощью формулы [89]:

$$p^{2} = \frac{3\hbar^{2}}{4} \frac{m_{e}^{0} - m_{e}}{m_{e}^{0} m_{e}} \frac{\varepsilon_{g}^{*} (\Delta + \varepsilon_{g}^{*})}{2\Delta + 3\varepsilon_{g}^{*}}$$
(2.10)

Значения параметров, входящие в (2.10) брали при температуре 4.2 К.

С учетом того, что заселенность «отщепленной» зоны дырок много меньше заселенностей других зон, при расчете транспортных свойств InSb учитывались электроны зоны проводимости, «тяжелые» и «легкие» дырки. Параметры модели Кейна, используемые при расчете дисперсионных кривых носителей заряда, приведены в Таблице 2.

Параметры	Обозначение	Значение	Ссылка
Ширина запрещенной зоны	$\mathcal{E}_{ m g}$	$(0,258-2,9\cdot10^{-4}T)$ 3B	[91]
Ширина запрещенной зоны без учета вклада электрон-фононного взаимодействия в ее температур- ное изменение	${m \mathcal{E}_{ ext{g}}}^{*}$	$(0,2436-0,96\cdot10^{-5}\cdot T)$ 9B	[91]
Эффективная масса электрона в Г- точке при <i>T</i> = 4.2 К	$rac{m_{ m e}}{m_{ m e}^0}$	0,014	[4; 5]
	A'	0	
Константы, учитывающие влия- ние базисных функций d- и f-типа на собственные функции электро- нов и дырок	М	-5,5	[92]
	L'	-2,7	
-	L'-N'-M	7,2	
Эффективная масса «тяжелых» дырок	$m_{ m hh}$	0,37	[91]
Спин-орбитальное расщепление валентных зон	Δ	0,81 эВ	[4; 5]

Таблица 2. Параметры модели Кейна в обозначениях работ [86; 89]

2.2 Механизмы рассеяния носителей заряда в InSb

При решении уравнения Больцмана для носителей заряда крайне важно корректным образом учесть механизмы рассеяния. Как уже отмечалось, антимонид индия относится к классу узкозонных полупроводников, в непараболичность законов дисперсии которых электронов и дырок существенно влияет на рассеяние носителей. При этом формулы для вероятности рассеяния, в которых в качестве решения невозмущенной задачи берутся волновые функции свободного электрона, не обеспечивают необходимой точности. В диссертации в качестве решения невозмущенной задачи, аналогично [86; 87; 90], использовались волновые функции с блоховскими множителями (2.6) и (2.7). Данный подход позволил получить значения кинетических коэффициентов качественно И количественно близкие к экспериментальным данным.

При решении уравнения Больцмана учитывались основные механизмы рассеяния электронов проводимости и дырок: электрон-фононное взаимодействие, включающее рассеяние на акустическом и оптическом деформационных потенциалах, рассеяние на пьезоакустическом потенциале и на полярных оптических фононах; рассеяние электронов на «тяжелых» дырках. В допированном InSb также учитывалось рассеяние носителей на ионизованных атомах примесей (ввиду того, что матричные элементы рассеяния носителей на ионизованных примесях и рассеяния электронов на «тяжелых» дырках похожи, указанные выше механизмы рассмотрены в одном подпараграфе) и на короткодействующем потенциале.

Другие механизмы рассеяния, такие как рассеяние на нейтральных атомах примесей, в расчет включены не были из-за того, что существенными они являются в области температур T < 5 K, которые в настоящей работе не рассматривались.

47

Ниже приведены выражения, описывающие вероятности перехода и метод их расчета для перечисленных выше механизмов рассеяния. В конце параграфа представлена таблица со значениями параметров, входящих в матричные элементы, определяющие вероятности рассеяния.

2.2.1 Рассеяние носителей заряда на деформационном акустическом потенциале

Для вычисления матричного элемента, отвечающего взаимодействию электронов проводимости с акустическими фононами, использовался формализм деформационного потенциала [93; 94]. Согласно [93], вероятность перехода при рассеянии на акустическом деформационном потенциале может быть представлена в следующем виде:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \sum_{\nu} \frac{\pi}{\rho V \omega_{\mathbf{q}}^{\nu}} \sum_{j',j} \left| I_{jj'}^{(\nu)} \right|^2 \left[N_q^{(\nu)} \delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega\right) + \left(N_q^{(\nu)} + 1\right) \delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega\right) \right]$$
(2.11)

где ρ – плотность кристалла, $N_{\mathbf{q}}$, $\omega_{\mathbf{q}}^{\nu}$ – функция распределения и угловая частота фонона *v*-й акустических ветви с волновым вектором **q**. Величины $I_{ii'}^{(\nu)}$ определяют угловую зависимость матричного элемента:

$$I_{jj'}^{(\nu)} = -i\sum_{\lambda,\lambda'} \mathbf{e}_{\lambda}^{\nu} q_{\lambda'} \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{\mathbf{k}',j'}^{*} \left(-\frac{p_{\lambda} p_{\lambda'}}{m_{0}} + V_{\lambda\lambda'} \right) u_{\mathbf{k},j} \mathbf{dr}$$
(2.12)

где $e^{(v)}$ – вектор поляризации, q – волновой вектор фонона, $\lambda, \lambda' = x, y, z, p$ – оператор импульса носителя заряда. Тензор $V_{\lambda,\lambda'}$ определен в [93]:

$$V_{mn} = \frac{1}{2 - \delta_{mn}} \lim_{\varepsilon_{mn} \to 0} \left\{ \frac{V_{\varepsilon} \left[(1 + \varepsilon) r \right] - V_{0}(r)}{\varepsilon_{mn}} \right\}$$
(2.13)

В формуле (2.13) V_ε и V₀ – возмущенный и невозмущенный потенциалы решетки.

Согласно [95], для вычисления функций $I_{jj'}^{(\nu)}$ необходимо определить, вообще говоря, 5 констант. В соединениях, кристаллизующихся в структуре

цинковой обманки, одна из констант пренебрежимо мала [95; 96]. Константы *l, m, n* определяют деформационные потенциалы уровней Γ_8 и Γ_7 , а константа *C* – деформационный потенциал уровня Γ_6 :

$$l = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} X \left(-\frac{p_x p_x}{m_0} + V_{xx} \right) \cdot X \cdot dr$$

$$m = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} Y \left(-\frac{p_x p_x}{m_0} + V_{xx} \right) \cdot Y \cdot dr$$

$$n = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} X \left(-\frac{p_x p_y}{m_0} + V_{xy} \right) \cdot Y \cdot dr$$

$$C = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} S \left(-\frac{p_x p_x}{m_0} + V_{xx} \right) \cdot S \cdot dr$$

(2.14)

Под функциями *S*, *X*, *Y*, *Z*, как и ранее, понимаются волновые функции *s*- и *p*симметрии. В качестве векторов поляризации удобно выбрать три ортогональных вектора:

$$\mathbf{e}_{ac}^{\parallel} = (e_1, e_2, e_3)$$

$$\mathbf{e}_{ac}^{\perp(1)} = (e_1^2 + e_2^2)^{-1/2} (-e_2, e_1, 0)$$

$$\mathbf{e}_{ac}^{\perp(2)} = (e_1^2 + e_2^2)^{-1/2} (-e_3 e_1, -e_3 e_2, e_1^2 + e_2^2)$$
(2.15)

где $e_1 = \cos\phi \sin\theta$, $e_2 = \cos\phi \sin\theta$, $e_3 = \cos\theta$ — направляющие косинусы волнового вектора фонона **q**.

Следует отметить, что в работе [95] вычисление вероятности перехода электронов проводимости в результате рассеяния на акустическом деформационном потенциале проведено с учетом непараболичности зоны проводимости, однако рассмотрение ограничено предположением об $I_{jj'}^{(v)}$ упругости взаимодействия. В настоящей работе расчет величин проводился аналогично [95], однако результаты получены без предположения об упругости механизма рассеяния. Кроме того, получены вероятности переходов для «тяжелых», а также вероятности межзонных переходов.

49

Ниже подробно рассмотрен процесс вычисления величин $I_{jj'}^{(\nu)}$ на примере $I_{1/2,1/2}^{''}$. Не нарушая общности [81], предполагалось, что ось *z* направлена по волновому вектору **k**. Рассмотрим интегралы, необходимые для вычисления $I_{jj'}^{(\nu)}$. С учетом (2.6) и (2.14):

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k\pm q, \frac{1}{2}}^{*} \left(-\frac{p_{x}p_{x}}{m_{0}} + V_{xx} \right) \cdot u_{k, \frac{1}{2}} d^{3}r = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k\pm q, j'}^{*} \left(-\frac{p_{y}p_{y}}{m_{0}} + V_{yy} \right) \cdot u_{k, j} d^{3}r =
= aa'C + \frac{bb'}{2} \frac{k_{z}}{k} (l+m) + cc' \frac{k_{z}}{k} m
\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k\pm q, \frac{1}{2}}^{*} \left(-\frac{p_{z}p_{z}}{m_{0}} + V_{zz} \right) \cdot u_{k, \frac{1}{2}} d^{3}r = aa'C + cc' \frac{k_{z}}{k} l + bb' \frac{k_{z}}{k} m
\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k\pm q, \frac{1}{2}}^{*} \left(-\frac{p_{x}p_{y}}{m_{0}} + V_{xy} \right) \cdot u_{k, \frac{1}{2}} d^{3}r = 0$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k\pm q, \frac{1}{2}}^{*} \left(-\frac{p_{x}p_{z}}{m_{0}} + V_{xz} \right) \cdot u_{k, \frac{1}{2}} d^{3}r = n \left(\frac{k_{x}}{k} \left(cc' - \frac{bb'}{2} \right) + i \frac{k_{y}}{k} \left(\frac{cb'}{\sqrt{2}} + \frac{bb'}{2} \right) \right)$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k\pm q, \frac{1}{2}}^{*} \left(-\frac{p_{y}p_{z}}{m_{0}} + V_{yz} \right) \cdot u_{k, \frac{1}{2}} d^{3}r = n \left(-i \frac{k_{x}}{k} \left(\frac{cb'}{\sqrt{2}} + \frac{bb'}{2} \right) + \frac{k_{y}}{k} \left(cc' - \frac{bb'}{2} \right) \right)$$

здесь коэффициенты a, b, c, которые были определены в параграфе 2.1, отвечают вектору **k**, а a', b', c' отвечают вектору **k**'.

Далее, исходя из формул (2.12), (2.15) и (2.16), было получено:

$$I_{1/2,1/2}^{''} = q \left(\left(e_x^2 + e_y^2 \right) \left(aa'C + \frac{bb'}{2} \frac{k_z}{k} (l+m) + cc' \frac{k_z}{k} m \right) + e_z^2 \left(aa'C + cc' \frac{k_z}{k} l + bb' \frac{k_z}{k} m \right) + 2e_x e_z \left(\frac{k_x}{k} \left(cc' - \frac{bb'}{2} \right) + i \frac{k_y}{k} \left(\frac{cb'}{\sqrt{2}} + \frac{bb'}{2} \right) \right) + 2e_y e_z n \left(-i \frac{k_x}{k} \left(\frac{cb'}{\sqrt{2}} + \frac{bb'}{2} \right) + \frac{k_y}{k} \left(cc' - \frac{bb'}{2} \right) \right) \right) = q \left(aa'C + \cos \theta_{k'k} \left(\frac{bb'}{2} (l+m) + cc'm + \cos^2 \theta_{kq} \left(\frac{bb'}{2} - cc' \right) (m-l) \right) + 2n \sin \theta_{kk'} \cos \theta_{kq} \sin \theta_{kq} \times \left(\cos^2 \phi \left(cc' - \frac{bb'}{2} \right) + i \cos \phi \sin \phi \left(\frac{cb'}{\sqrt{2}} + \frac{bb'}{2} \right) - i \sin \phi \cos \phi \left(\frac{cb'}{\sqrt{2}} + \frac{bb'}{2} \right) + \sin^2 \phi \left(cc' - \frac{bb'}{2} \right) \right) \right) = q \left\{ aa'C + \cos \theta_{kk'} \left[\frac{bb'}{2} (l+m) + cc'm + \cos^2 \theta_{kq} \left(\frac{bb'}{2} - cc' \right) (m-l) \right] + \sin^2 \phi \left(cc' - \frac{bb'}{2} \right) \right) \right\}$$

$$(2.17)$$

В (2.17) введены обозначения: $\theta_{kk'}$ – угол между векторами **k** и **k**', θ_{kq} угол между векторами **k** и **q**, ϕ – азимутальный угол вектора **k**' в системе координат, в которой вектор **k** направлен по оси *z*.

Исходя из вида угловой зависимости матричного элемента [81], согласно [95], выражение (2.17) усреднялось по углу *ф*:

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\prime\prime}\right|^{2} = q^{2} \left(aa'C + \cos\theta_{kk'} \left(\frac{bb'}{2}(l+m) + cc'm + \cos^{2}\theta_{kq} \left(\frac{bb'}{2} - cc'\right)(m-l)\right) + n\sin\theta_{kk'} \sin 2\theta \left(cc' - \frac{bb'}{2}\right)\right)^{2}$$
(2.18)

Выражение (2.18) вычислено в предположении неупругости процесса рассеяния и может быть приведено к виду, полученному для величины $|I_{1/2,1/2}^{//}|^2$ в работе [95], путем замены *a*', *b*', *c*' на *a*, *b*, *c*.

Вычисления $I_{jj'}^{(\nu)}$ проводились аналогично вычислению $I_{1/2,1/2}^{/\prime}$. Учитывая вид блоховских множителей, для электронов проводимости и «легких» дырок было получено:

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\perp(1)}\right|^{2} = q^{2} \cos^{2} \theta_{kq} \sin^{2} \theta_{kk'} \left(\frac{cb'}{\sqrt{2}} + \frac{bb'}{2}\right)^{2} n^{2}$$
(2.19)

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\perp(2)}\right|^{2} = q^{2} \left(\frac{\sin 2\theta_{kq}}{2} \cos \theta_{kk'} (l-m) - \cos 2\theta_{kq} \sin \theta_{kk'} n\right)^{2} \left(cc' - \frac{bb'}{2}\right)^{2}$$
(2.20)

$$\begin{aligned} \left|I_{1/2,-1/2}^{\prime\prime}\right|^{2} &= \frac{q^{2}}{32}\sin^{4}\theta_{kq}\sin^{2}\theta_{kk'}b^{2}\left(b'+c'\sqrt{2}\right)^{2}\left(l-m-2n\right)^{2} + \\ &+ \frac{q^{2}}{4}\left[\sqrt{2}\left(bc'l-b'\left(b-c\sqrt{2}\right)m\right)\sin\theta_{kk'} - \\ &-\left(\cos^{2}\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}l+\sin2\theta_{kq}\cos\theta_{kk'}n\right)\left(bc'-cb'\right)\right]^{2} - \\ &- \frac{q^{2}}{8}\sin^{2}\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}b\left(b'+c'\sqrt{2}\right)\left(l-m-2n\right)\left(\sin\theta_{kk'}\left(bc'\sqrt{2}l-b'\left(b-c\sqrt{2}\right)m\right) - \\ &-\sqrt{2}\left(\cos^{2}\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}l+\sin2\theta_{kq}\cos\theta_{kk'}n\right)\left(bc'-cb'\right)\right) \end{aligned}$$
(2.21)

$$\begin{split} \left|I_{l/2,-l/2}^{\perp(1)}\right|^{2} &= \frac{q^{2}}{32}\sin^{2}\theta_{kq}\sin^{2}\theta_{kk'}\left(bb'+bc'\sqrt{2}\right)^{2}\left(\left(l-m\right)^{2}+4n^{2}\right)+ \\ &+ \frac{q^{2}}{2}\cos^{2}\theta_{kq}\cos^{2}\theta_{kk'}\left(bc'-bc'\right)^{2}n^{2}+ \\ &+ \frac{q^{2}}{32\sqrt{2}}\sin 2\theta_{kq}\sin 2\theta_{kk'}\left(bb'+bc'\sqrt{2}\right)\left(bc'-bc'\right)\left(l-m+4n\right)n \\ \left|I_{l/2,-l/2}^{\perp(2)}\right|^{2} &= \frac{q^{2}}{128}\sin^{2}\theta_{kk'}\sin^{2}2\theta_{kq}\left(bb'+cb'\sqrt{2}\right)^{2}\left(l-m-2n\right)^{2}+ \\ &+ \frac{q^{2}}{4}\left(2\cos 2\theta\cos \theta_{kk'}n+\sin 2\theta_{kq}\sin \theta_{kk'}l\right)^{2}\left(bc'-bc'\right)^{2}- \\ &- \frac{q^{2}}{16\sqrt{2}}\sin \theta_{kk'}\sin 2\theta_{kq}\left(bb'+cb'\sqrt{2}\right)\left(bc'-bc'\right)\times \\ &\times (l-m-2n)\left(2\cos 2\theta_{kq}\cos \theta_{kk'}n+\sin 2\theta_{kq}\sin \theta_{kk'}l\right) \end{split}$$

Для «тяжелых» дырок были проведены аналогичные вычисления. Ниже приведены полученные формулы:

$$\left|I_{3/2,-3/2}^{\prime\prime}\right|^{2} = \frac{q^{2}\delta^{2}}{8} \left(\left(\sin^{2}\theta_{kq}\cos\theta_{kk'}(m-l) + \sin 2\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}n\right)^{2} + \left(\sin 2\theta_{kq}\sin\theta_{kk'} - 2\sin^{2}\theta_{kq}\right)^{2}n^{2} \right)$$
(2.24)

$$\left|I_{3/2,-3/2}^{\perp(1)}\right|^{2} = \frac{q^{2}}{2}\sin^{2}\theta_{kq}\cos^{2}\theta_{kk'}\delta^{2}\left(\left(\frac{m-l}{2}\right)^{2} + n^{2}\right)$$
(2.25)

$$\left|I_{3/2,-3/2}^{\perp(2)}\right|^{2} = \frac{q^{2}}{8} \left(\left(\sin 2\theta_{kq} \cos \theta_{kk'} \frac{m-l}{2} + \cos 2\theta_{kq} \sin \theta_{kk'} n\right)^{2} + \left(2.26\right) \right)^{2} \right)$$

 $+n^{2}\left(\sin 2\theta_{kq}\cos \theta_{kk'}-\cos 2\theta_{kq}\sin \theta_{kk'}\right)^{2}\right)$

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\parallel}\right|^{2} = q^{2} \frac{\left(A_{1}^{\parallel} + C_{1}^{\parallel}\right)^{2} + \left(B_{1}^{\parallel} + C_{1}^{\parallel}\right)^{2}}{2}$$
(2.27)

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\perp(1)}\right|^{2} = q^{2} \frac{\left(A_{1}^{\perp(1)} + C_{1}^{\perp(1)}\right)^{2} + \left(B_{1}^{\perp(1)} + C_{1}^{\perp(1)}\right)^{2}}{2}$$
(2.28)

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\perp(2)}\right|^{2} = q^{2} \left(\frac{\left(A_{1}^{\perp(2)}\right)^{2}}{2} + \left(B_{1}^{\perp(2)}\right)^{2} + \left(C_{1}^{\perp(2)}\right)^{2} + A_{1}^{\perp(2)}B_{1}^{\perp(2)}\right),$$
(2.29)

где для краткости введены обозначения:

$$A_{l}^{\parallel} = \frac{1}{4} \sin^{2} \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} \delta(m-l)$$

$$B_{l}^{\parallel} = -\frac{1}{2} \sin^{2} \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} \delta n$$

$$(2.30)$$

$$C_{l}^{\parallel} = \frac{1}{4} \left(\sin \theta_{kk'} \delta^{-1} \left(\sin^{2} \theta_{kq} \left(l-m \right) + 2m \right) - 4 \sin 2\theta_{kq} \cos \theta_{kk'} \delta n \right)$$

$$A_{l}^{\perp(1)} = \frac{1}{4} \sin \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} \delta(l-m)$$

$$B_{l}^{\perp(1)} = -\frac{1}{2} \sin \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} \delta n$$

$$C_{l}^{\perp(1)} = \cos \theta_{kq} \cos \theta_{kk'} \delta n$$

$$A_{l}^{\perp(2)} = -\frac{1}{8} \sin 2\theta_{kq} \sin \theta_{kk'} \delta(m-l)$$

$$B_{l}^{\perp(2)} = \frac{1}{8} \left(-\sin 2\theta_{kq} \sin \theta_{kk'} \delta^{-1} \left(l-m \right) + 8\cos 2\theta_{kq} \cos \theta_{kk'} \delta n \right)$$

$$(2.32)$$

$$C_{l}^{\perp(2)} = \frac{1}{4} \sin 2\theta_{kq} \sin \theta_{kk'} \delta n$$

Как уже отмечалось, в InSb в результате рассеяния носителей заряда возможны переходы между зонами «легких» и «тяжелых» дырок. Методика их расчета аналогична вычислениям, проведенным выше, за исключением того, что в формуле (2.12) блоховские множители начального и конечного состояний относятся к различным зонам. Ниже приведены результаты:

$$\left|I_{3/2,1/2}^{\parallel}\right|^{2} = q^{2} \left[\left(\sin^{2} \theta_{kq} \left(\sqrt{2}cm + \frac{b(l+m)}{2} \right) + \cos^{2} \theta_{kq} \left(\sqrt{2}cl + bm \right) \right) \delta \cos \theta_{kk'} + \frac{n}{\sqrt{2}} \sin \theta_{kq} \cos \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} \left(\left(c - \sqrt{2}b \right) \delta - c \delta^{-1} \right) \right]^{2} \right]^{2}$$

$$(2.33)$$

$$\left|I_{3/2,1/2}^{\perp(1)}\right|^{2} = q^{2}\cos^{2}\theta_{kq}\sin^{2}\theta_{kk'}\frac{n^{2}}{8}\left(\left(c-\sqrt{2}b\right)\delta+c\delta^{-1}\right)^{2}$$
(2.34)

$$\left|I_{3/2,1/2}^{\perp(2)}\right|^{2} = q^{2} \left(-\sin\theta_{kq}\cos\theta_{kq}\cos\theta_{kk'}\delta\left(l-m\right)\left(\frac{b}{2}-\sqrt{2}c\right) - \cos2\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}\frac{n}{2\sqrt{2}}\left(\left(c-\sqrt{2}b\right)\delta-\delta^{-1}c\right)\right)^{2}$$

$$(2.35)$$

$$\left|I_{3/2,-1/2}^{\parallel}\right|^{2} = \frac{q^{2}}{2} \left(\left(A_{2}^{\parallel} + B_{2}^{\parallel}\right)^{2} + \left(A_{2}^{\parallel} - C_{2}^{\parallel}\right)^{2} + D_{2}^{\parallel} + \left(2A_{2}^{\parallel} + B_{2}^{\parallel} - C_{2}^{\parallel}\right)E_{2}^{\parallel} \right)$$
(2.36)

$$\left|I_{3/2,-1/2}^{\perp(1)}\right|^{2} = \frac{q^{2}}{2} \left(\left(A_{2}^{\perp(1)}\right)^{2} + \left(B_{2}^{\perp(1)}\right)^{2} + C_{2}^{\perp(1)} - \left(A_{2}^{\perp(1)} + B_{2}^{\perp(1)}\right) D_{2}^{\perp(1)} \right)$$
(2.37)

$$\left|I_{3/2,-1/2}^{\perp(2)}\right|^{2} = \frac{1}{2} \left(\left(A_{2}^{\perp(2)}\right)^{2} + \left(A_{2}^{\perp(2)} + B_{2}^{\perp(2)}\right)^{2} + \left(C_{2}^{\perp(2)}\right)^{2} - \left(2A_{2}^{\perp(2)} + B_{2}^{\perp(2)}\right)D_{2}^{\perp(2)} + E_{2}^{\perp(2)} \right)$$
(2.38)

где введены обозначения:

$$\begin{aligned} A_{2}^{\parallel} &= \frac{\delta}{4} \sin \theta_{kk'} \left(\sin^{2} \theta_{kq} \left(b \left(l + m \right) + 2\sqrt{2}cn \right) + 2\cos^{2} \theta_{kq} \left(bm + \sqrt{2}cl \right) \right) \\ B_{2}^{\parallel} &= \frac{\delta^{-1}}{4} \sin^{2} \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} b \left(m - l \right) \\ C_{2}^{\parallel} &= \frac{\delta^{-1}}{\sqrt{2}} \sin^{2} \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} bn \end{aligned} \tag{2.39} \\ D_{2}^{\parallel} &= \delta^{2} \sin^{2} 2\theta_{kq} \cos^{2} \theta_{kk'} \left(2b^{2} + c^{2} \right) n^{2} \\ E_{2}^{\parallel} &= 2\delta \sin 2\theta_{kq} \cos \theta_{kk'} bn \\ A_{2}^{\perp(1)} &= \frac{\delta^{-1}}{4} \sin \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} b \left(l - m \right) \\ B_{2}^{\perp(1)} &= \frac{\delta^{-1}}{\sqrt{2}} \sin \theta_{kk'} \sin \theta_{kq} bn \end{aligned} \tag{2.40} \\ C_{2}^{\perp(1)} &= \delta^{2} \cos^{2} \theta_{kq'} \cos^{2} \theta_{kk'} n^{2} \left(2b^{2} + c^{2} \right) \\ D_{2}^{\perp(1)} &= 2\delta \cos \theta_{kq} \cos \theta_{kk'} nb \\ A_{2}^{\perp(2)} &= \frac{\delta}{4} \sin \theta_{kq} \cos \theta_{kq} \left(-b \left(l + m \right) - 2\sqrt{2}cn + 2 \left(bm + \sqrt{2}cl \right) \right) \sin \theta_{kk'} \\ B_{2}^{\perp(2)} &= \frac{\delta^{-1}}{4} b \sin \theta_{kq} \cos \theta_{kq} \left(l - m \right) \sin \theta_{kk'} \\ C_{2}^{\perp(2)} &= \frac{\delta^{-1}}{\sqrt{2}} b \sin \theta_{kq} \cos \theta_{kq} n \sin \theta_{kk'} \end{aligned} \tag{2.41} \\ D_{2}^{\perp(2)} &= 2\delta \cos 2\theta_{kq} \cos \theta_{kk'} nb \\ E_{2}^{\perp(2)} &= \delta^{2} \cos^{2} 2\theta_{kq} \cos^{2} \theta_{kk'} n^{2} \left(2b^{2} + c^{2} \right) \end{aligned}$$

2.2.2 Рассеяние носителей заряда на оптическом деформационном потенциале

В соединениях $A^{III}B^{v}$ на элементарную ячейку приходится два неэквивалентных атома. Известно, что определенную роль в таких кристаллах может играть рассеяние на длинноволновых оптических фононах [97]. Теория рассеянии носителей заряда на длинноволновых оптических фононах в общем виде была предложена Биром и Пикусом [93; 94]. На основе разработанного подхода в работе [97] была рассмотрена проблема рассеяния электронов проводимости на оптических фононах применительно к антимониду индия. В [97] было показано, что учет спин-орбитального взаимодействия приводит к анизотропии вероятности рассеяния носителей заряда. Ниже рассмотрено рассеяния электронов проводимости, «легких» и «тяжелых» дырок на длинноволновых оптических фононах в модели Кейна.

Матричный элемент рассеяния носителей заряда на оптическом деформационном потенциале может быть записан следующим образом [93; 97]:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{\pi}{\rho V a_0^2 \omega_{\mathbf{q}}} \sum_{jj'} \left| I_{jj'}^{\nu}(q) \right|^2 \left[N_q^{(\nu)} \delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega\right) + \left(N_q^{(\nu)} + 1\right) \delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega\right) \right]$$
(2.42)

где величины $I_{jj'}^{(v)}$, как и в случае рассеяния на акустическом деформационном потенциале, определяют угловую зависимость матричного элемента:

$$I_{jj'}^{\nu}(\mathbf{q}) = \frac{a_0}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k',j'}^* \left(\mathbf{e}^{(\nu)} \mathbf{W}^{\mathbf{0}} \right) u_{k,j} \mathbf{dr}$$
(2.43)

В формуле (2.43) под величиной W⁰ – понимается оптический потенциал деформации.

В отличие от рассеяния носителей заряда на деформационном акустическом потенциале, для описания рассеяния носителей на оптическом деформационном потенциале достаточно ввести две константы [97]:

55

$$d_{0} = \frac{a_{0}}{\Omega} \int_{\Omega} XW_{y}^{0} Z \mathbf{dr}$$

$$d_{1} = \frac{a_{0}}{\Omega} \int_{\Omega} SW_{x}^{0} X \mathbf{dr}$$
(2.44)

В диссертации для вероятности перехода при рассеянии электронов на деформационном оптическом потенциале использовались результаты работ [93; 97]. Вероятность перехода для «тяжелых», а также вероятности перехода между зонами «легких» и «тяжелых» дырок были нами получены аналогичным образом. Процедура расчета указанных вероятностей похожа на процедуру вычисления вероятностей перехода для носителей заряда при рассеянии на акустическом деформационном потенциале, поэтому ниже, опуская промежуточные выкладки, приведены результирующие выражения.

Для электронов проводимости в [97] были получены следующие формулы, которые также применимы для описания вероятность перехода «легких» дырок:

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\parallel}\right|^{2} = \frac{\sin^{2}\theta_{kq}\sin^{2}\theta_{kk'}}{8}d_{0}^{2}\left(\left(2cc'-bb'\right)^{2}+b'^{2}\left(c\sqrt{2}+b\right)^{2}\right)+$$
(2.45)

$$+d_1^2 \left(ac'\sin\theta_{kq}\sin\theta_{kk'} + \cos\theta_{kq}\left(ac'\cos\theta_{kk'} - a'c\right)\right)^2$$

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\perp(1)}\right|^{2} = \frac{\sin^{2}\theta_{kk'}}{2} \left(\frac{d_{0}^{2}}{4} \left(\left(2cc'-bb'\right)^{2} + \left(cb'\sqrt{2}+bb'\right)^{2}\right) + d_{1}^{2}a^{2}b'^{2}\right)$$
(2.46)

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\perp(2)}\right|^{2} = \frac{d_{0}^{2}}{8}\cos^{2}\theta_{kq}\sin^{2}\theta_{kk'}\left(\left(2cc'-bb'\right)^{2}+\left(cb'\sqrt{2}+bb'\right)^{2}\right)+d_{1}^{2}\left(ac'\cos\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}-\sin\theta_{kq}\left(-a'c+ac'\frac{k_{z}}{k}\right)\right)^{2}\right)$$
(2.47)

$$\left|I_{1/2,-1/2}^{\parallel}\right|^{2} = d_{0}^{2} \left(\sin\theta_{kq}\cos\theta_{kk'}\frac{1}{\sqrt{2}}(b'c-bc') - \cos\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}\frac{b}{2}(b'+c'\sqrt{2})\right)^{2} + \frac{d_{1}^{2}}{2} \left(-\sin\theta_{kq}(a'b+ab'\cos\theta_{kk'}) + \cos\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}ab'\right)^{2}$$
(2.48)

$$\left|I_{1/2,-1/2}^{\perp(1)}\right|^{2} = \frac{d_{0}^{2}}{2} \left(\cos\theta_{kk'}\left(b'c-bc'\right)\right)^{2} + \frac{d_{1}^{2}}{2} \left(a'b+ab'\cos\theta_{kk'}\right)^{2}$$
(2.49)

$$\left|I_{1/2,-1/2}^{\perp(2)}\right|^{2} = d_{0}^{2} \left(\cos\theta_{kq} \frac{k_{z}}{k} \frac{(b'c-bc')}{\sqrt{2}} + \sin\theta_{kq} \sin\theta_{kk'} b \frac{b'+c'\sqrt{2}}{2}\right)^{2} + d_{1}^{2} \left(\cos\theta_{kq} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(a'b+ab' \frac{k_{z}}{k}\right) + \sin\theta_{kq} \sin\theta_{kk'} \frac{ab'}{\sqrt{2}}\right)^{2} \right)^{2}$$
(2.50)

Для «тяжелых» дырок с учетом (2.7) получено:

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\parallel}\right|^{2} = d_{0}^{2} \delta^{2} \left(\sin \theta_{kq} \cos \theta_{kk'} + \frac{1}{2} \cos \theta_{kq} \sin \theta_{kk'}\right)^{2}$$
(2.51)

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\perp(1)}\right|^2 = d_0^2 \delta^2 \cos^2 \theta_{kk'}$$
(2.52)

$$\left|I_{1/2,1/2}^{\perp(2)}\right|^{2} = d_{0}^{2} \delta^{2} \left(\cos \theta_{kk'} \cos \theta_{kq} + \frac{1}{2} \sin \theta_{kq} \sin \theta_{kk'}\right)^{2}$$
(2.53)

$$\left|I_{1/2,-1/2}^{\parallel}\right|^{2} = \frac{d_{0}^{2}}{4} \delta^{2} \left(\sin \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} - \cos \theta_{kk'} \cos \theta_{kq}\right)^{2}$$
(2.54)

$$\left|I_{1/2,-1/2}^{\perp(1)}\right|^2 = \frac{d_0^2}{4} \delta^2 \sin^2 \theta_{kk'}$$
(2.55)

$$\left|I_{1/2,-1/2}^{\perp(2)}\right|^{2} = \frac{d_{0}^{2}}{4} \delta^{2} \left(\cos\theta_{kq}\sin\theta_{kk'} + \cos\theta_{kk'}\sin\theta_{kq}\right)^{2}$$
(2.56)

Аналогичным образом, для вероятности межзонных переходов получены выражения:

$$\left|I_{3/2,1/2}^{\parallel}\right|^{2} = \frac{1}{8}\sin^{2}\theta_{kq}\sin^{2}\theta_{kk}d_{0}^{2}\left(\delta^{2}\left(c-\sqrt{2}b\right)^{2}+\delta^{-2}c^{2}\right)+ \frac{d_{1}^{2}a^{2}}{8}\left(\sin\theta_{kq}\sin\theta_{kk}\left(\delta-\delta^{-1}\right)+4\cos\theta_{kq}\cos\theta_{kk'}\delta\right)^{2}$$
(2.57)

$$\left|I_{3/2,1/2}^{\perp(1)}\right|^{2} = \frac{\sin^{2}\theta_{kk'}}{8} \left(d_{0}^{2} \left(\left(\delta c - \sqrt{2}\delta b\right)^{2} + \delta^{-2}c^{2}\right) + \left(\delta + \delta^{-1}\right)^{2}a^{2}d_{1}^{2}\right)$$
(2.58)

$$\left| I_{3/2,1/2}^{\perp(2)} \right|^{2} = \frac{d_{1}^{2}a^{2}}{8} \left(4\sin\theta_{kq}\cos\theta_{kk'}\delta - \cos\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}\left(\delta - \delta^{-1}\right) \right)^{2} + \frac{1}{8}d_{0}^{2}\cos\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}\left(\left(\delta c - \sqrt{2}\delta b\right)^{2} + \delta^{-2}c^{2} \right)$$
(2.59)

$$\left|I_{3/2,-1/2}^{\parallel}\right|^{2} = \frac{1}{2} \left(\sin^{2}\theta_{kq}\cos^{2}\theta_{kk'}\delta^{2}\left(a^{2}d_{1}^{2}+\left(c-\sqrt{2}b\right)^{2}d_{0}^{2}\right)+ \cos^{2}\theta_{kq}\sin^{2}\theta_{kk'}\left(\delta^{2}a^{2}d_{1}^{2}+\frac{1}{2}\delta^{-2}b^{2}d_{0}^{2}\right)+ \sin\theta_{kq}\cos\theta_{kk'}\cos\theta_{kq}\sin\theta_{kk'}\delta\left(\sqrt{2}\left(c-\sqrt{2}b\right)\delta^{-1}bd_{0}^{2}-2\delta a^{2}d_{1}^{2}\right)\right)$$

$$= 57$$

$$\begin{aligned} \left| I_{3/2,-1/2}^{\perp(1)} \right|^{2} &= \cos^{2} \theta_{kk'} \delta^{2} \left(a^{2} \frac{d_{1}^{2}}{2} + \left(c \frac{d_{0}}{\sqrt{2}} - b d_{0} \right)^{2} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left| I_{3/2,-1/2}^{\perp(2)} \right|^{2} &= \frac{1}{2} \left(\cos^{2} \theta_{kq} \cos^{2} \theta_{kk'} \delta^{2} \left(a^{2} d_{1}^{2} + \sqrt{2} d_{0}^{2} \left(c - \sqrt{2} b \right)^{2} \right) + \\ &+ \sin^{2} \theta_{kq} \sin^{2} \theta_{kk'} \left(\delta^{2} a^{2} d_{1}^{2} + \delta^{-2} b^{2} d_{0}^{2} \right) + \\ &+ \cos \theta_{kq} \cos \theta_{kk'} \sin \theta_{kq} \sin \theta_{kk'} \delta \left(2a^{2} d_{1}^{2} \delta - \sqrt{2} \left(c - \sqrt{2} b \right) \delta^{-1} b d_{0}^{2} \right) \right) \end{aligned}$$

$$(2.61)$$

2.2.3 Рассеяние носителей заряда на полярных оптических фононах

При рассмотрении рассеяния носителей заряда на оптических продольных фононах в полярных полупроводниковых материалах, помимо процессов рассеяния на потенциале деформации, также необходимо учитывать взаимодействие носителей с дальнодействующими макроскопическими электрическими полями, возникающими вследствие указанных колебаний. Данный тип рассеяния является одним из определяющих в соединениях А^{III}В^V [33; 86].

Согласно [98], вероятность перехода при рассеянии на оптических полярных фононах:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{4\pi^2 e^2 \omega}{V q^2} \frac{1}{\kappa^*} \sum_{j',j} \left| I_{jj'}^{(\nu)} \right|^2 \left[N_q^{(\nu)} \delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega\right) + \left(N_q^{(\nu)} + 1\right) \delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega\right) \right]$$
(2.63)

где $1/\kappa^* = 1/\kappa_{\infty} - 1/\kappa_0$, а κ_{∞} и κ_0 – высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости. Множитель $|I_{jj'}^{(\nu)}|$ определяется из формулы:

$$I(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \sum \frac{1}{V} \int_{V} u_{k',j'}^* u_{k,j} \mathbf{dr}$$
(2.64)

Величина $|I_{jj'}^{(v)}|$, как и ранее, определяет угловую зависимость вероятности перехода носителей заряда (Корректный учет непараболичности закона дисперсии электронов и дырок играет важную роль. Так, например, ее учет в

рассматриваемом механизме в антимониде индия, согласно оценке [33], увеличивает эффективное время релаксации примерно в два раза).

Вычисление интеграла для электронов проводимости и дырок аналогичны вычислениям, проведенным в [33; 95]. Ниже приведены результаты для электронов проводимости, «легких» и «тяжелых» дырок, а также для межзонных переходов.

При вычислении (2.64) следует учесть свойство ортогональности волновых функций *S*, *X*, *Y*, *Z*, а также условия нормировки:

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} S^* S \cdot \mathbf{dr} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} X^* X \cdot \mathbf{dr} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} Y^* Y \cdot \mathbf{dr} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} Z^* Z \cdot \mathbf{dr} = 1$$
(2.65)

Для электронов проводимости и «легких» дырок с учетом (2.6):

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k',1/2}^{*} u_{k,1/2} dr = aa' + (cc' + bb') \cos \theta_{k}$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k',-1/2}^{*} u_{k,1/2} dr = \left(\frac{bb' - bc'\sqrt{2}}{2} - \frac{cb'}{\sqrt{2}} \right) \sin \theta_{k} e^{i\phi}$$

$$I(k,k') = \left(aa' + (cc' + bb') \cos \theta_{kk'} \right)^{2} + \left(\frac{bb' - bc'\sqrt{2}}{2} - \frac{cb'}{\sqrt{2}} \right)^{2} \sin^{2} \theta_{kk'}$$
(2.66)
$$(2.67)$$

Для «тяжелых» дырок, аналогично [99; 100]:

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k',3/2}^* u_{k,3/2} dr = \frac{1}{4} \frac{k_+}{k} \delta^{-1} = \frac{1}{4} \sin \theta_{kk'} e^{i\phi} \delta^{-1}$$

$$\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} u_{k',-3/2}^* u_{k,3/2} dr = 0$$
(2.68)

$$I(k,k') = \frac{\sin^2 \theta_{kk'}}{4} \delta^{-2} = \frac{1 + 3\cos^2 \theta_{kk'}}{4}$$
(2.69)

Для вероятности межзонных переходов, согласно [99; 100]:

$$I(k,k') = \frac{\sin^2(\theta_{kk'})}{4} (\sqrt{2}c + b)^2$$
 (2.70)

В формуле (2.63) не учтен эффект экранировки электрического потенциала носителями заряда. Роль данного эффекта обсуждалась в [90]. В [33; 90]

показано, что учет экранировки приводит к ослаблению энергии взаимодействия носителей заряда с полярными оптическими колебаниями:

$$\hat{H}_{_{3\kappa p}} = \hat{H} \cdot \left(1 + 1/q^2 r_0^2\right)^{-1}$$
(2.71)

где $\hat{H}_{_{3KP}}$ – результирующий гамильтониан, \hat{H} - гамильтониан без учета экранировки, r_0 – радиус экранировки, который определяется формулой [101; 102]:

$$r_0^{-2} = \frac{4\pi e^2}{\kappa_0} \sum_i \int \left(-\frac{\partial f_0^{(i)}}{\partial \varepsilon} \right) d\mathbf{k}$$
(2.72)

В выражении (2.72) суммирование ведется по всем типам носителей.

Несложно убедиться, что формула (2.72) для невырожденных полупроводников переходит в формулу Дебая для радиуса экранировки. В пределе сильно вырожденных полупроводников формула преобразуется в выражение, определяющее радиус Томаса-Ферми.

Кроме того, для корректного учета обсуждаемого эффекта, следует перенормировать частоту продольных оптических фононов [33]:

$$\omega_{\scriptscriptstyle \mathfrak{s}\kappa p} = \omega_{\mathbf{q}} \left(1 + \frac{\kappa_{\scriptscriptstyle \infty}}{\kappa_{\scriptscriptstyle 0}} \frac{1}{\left(qr_{\scriptscriptstyle 0}\right)^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{1}{\left(qr_{\scriptscriptstyle 0}\right)^2} \right)^{-\frac{1}{2}}$$
(2.73)

здесь ω_q - частота продольных оптических фононов без учета экранировки.

2.2.4 Рассеяние носителей заряда на пьезоакустическом потенциале

В кристаллах InSb отсутствует центр симметрии, поэтому при распространении акустических волн помимо потенциала деформации возникает пьезоэлектрический потенциал, рассеяние носителей заряда на котором существенно при достаточно низких температурах. Вероятность перехода при рассеянии на указанном потенциале, согласно [87], вычисляется с помощью формулы:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{64\pi^3 e^2 e_{14}^2}{V\rho\kappa_0^2} \sum_{j',j} \left| I_{jj'}^{(\nu)} \right|^2 \sum_{\nu} \frac{K_{\nu}^2}{\omega_{\nu}} \left[N_q^{(\nu)} \delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega\right) + \left(N_q^{(\nu)} + 1\right) \delta\left(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}\right) \right]$$
(2.74)

где величина К, определяется следующим образом [87]:

$$K_{\nu} = e_{ac1}^{\nu} e_2 e_3 + e_{ac2}^{\nu} e_1 e_3 + e_{ac3}^{\nu} e_1 e_2$$
(2.75)

Обозначения в (2.74) аналогичны обозначениям предыдущих подпараграфов.

Учитывая угловую зависимость проекций вектора поляризации (2.15), и, усредняя по азимутальному углу, получено:

$$K_{\parallel} = \frac{3}{2} \sin 2\phi \sin^{2} \theta_{kq} \cos \theta_{kq}$$

$$\overline{K}_{\parallel}^{2} = \frac{9}{4} \overline{\sin^{2} 2\phi} \sin^{4} \theta_{kq} \cos^{2} \theta_{kq} = \frac{9}{8} \sin^{4} \theta_{kq} \cos^{2} \theta_{kq}$$

$$K_{\perp(1)} = -\sin^{2} \phi \sin \theta_{kq} \cos \theta_{kq} + \cos^{2} \phi \sin \theta_{kq} \cos \theta_{kq} = \cos 2\phi \sin \theta_{kq} \cos \theta_{kq}$$

$$\overline{K}_{\perp(1)}^{2} = \overline{\cos^{2} 2\phi} \sin^{2} \theta_{kq} \cos^{2} \theta_{kq} = \frac{\sin^{2} 2\theta_{kq}}{8}$$

$$K_{\perp(2)} = \frac{\sin 2\phi \sin \theta_{kq}}{2} (1 - 3\cos^{2} \theta_{kq})$$

$$\overline{K}_{\perp(2)}^{2} = \frac{\sin^{2} 2\phi \sin^{2} \theta_{kq}}{4} (1 - 3\cos^{2} \theta_{kq})^{2} = \frac{\sin^{2} \theta_{kq}}{8} (1 - 3\cos^{2} \theta_{kq})^{2}$$

 $\sum_{j',j} \left| I_{jj'}^{(\nu)} \right|^2$ в формуле (2.74) эквивалентна величине (2.64) [87].

Следует отметить, что при рассеянии на пьезоакустическом потенциале, также необходимо учесть эффект экранировки носителями заряда. Учет экранировки потенциала приводит к ослаблению энергии взаимодействия аналогично (2.71).

2.2.5 Рассеяние на ионизованных атомах примесей. Рассеяние электронов на «тяжелых» дырках

Рассеяние на ионизованных атомах примесей существенно в кристаллах p- и n-типа во всем диапазоне температур. При низких температурах данный тип рассеяния является основным. Имеется несколько моделей [103; 104; 105], описывающих указанное рассеяние, в диссертации рассмотрены четыре основных: приближения Конуэлл-Вайскопфа [106] и Брукса-Херринга [107], метод исключения третьего тела [108], метод сдвигов фаз [109]. Также в разделе рассматривается задача об электрон-дырочном рассеянии, которая вследствие большого отношения эффективных масс электронов и «тяжелых» дырок сводится к задаче о рассеянии на заряженной примеси [105].

2.2.5.1 Приближение Конуэлл-Вайскопфа

При рассеянии на чисто кулоновском потенциале сечение рассеяния носителей заряда стремится к бесконечности. Данная трудность в приближении Конуэлл-Вайскопфа устраняется с помощью ограничения значений прицельного параметра половиной среднего расстояния между атомами примесей [105; 106]:

$$b_{\max} = \frac{N_{\rm I}^{-1/3}}{2} \tag{2.77}$$

где *N*_I – концентрация ионизированных примесных атомов.

Прицельный параметр и угол рассеяния, согласно [105], связаны соотношением

$$b = \frac{Ze^2}{2\kappa_0 \varepsilon_{\mathbf{k}}^{1/2}} \operatorname{ctg}\left(\frac{\theta}{2}\right)$$
(2.78)

где Z – заряд ионизованной примеси (в единицах e).

С учетом (2.77) формулу (2.78) можно преобразовать к виду удобному для дальнейших вычислений:

$$\theta_{\min} = 2 \arctan\left(\frac{Ze^2 N_{\rm I}^{1/3}}{\kappa_0 \varepsilon_{\rm k}^{1/2}}\right)$$
(2.79)

где θ_{\min} – минимальный угол рассеяния.

Сечение рассеяния вычисляется аналогично формуле Резерфорда:

$$\sigma(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{Z^2 e^4}{4\kappa_0^2 k^4 \sin^4(\theta/2)} \left(\frac{\hbar^2}{m}\right)^{-2}$$
(2.80)

Вероятность перехода $W(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ в результате рассеяния, согласно [104; 110], связана с дифференциальным сечением рассеяния следующим образом:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{N_{\rm I}}{V} \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m}\right)^2 \sigma(\mathbf{k},\mathbf{k}') \tag{2.81}$$

Окончательно, для $W(\mathbf{k},\mathbf{k}')$ получим:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \begin{cases} 0, & \text{при } \theta < \theta_{\min} \\ \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_{\text{I}}}{V} \left(\frac{2\pi Z e^2}{\kappa_0}\right)^2 \frac{\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})}{4k^4 \sin^4(\theta/2)} \sum_{j',j} \left|I_{jj'}^{(\nu)}\right|^2, & \text{при } \theta \ge \theta_{\min} \end{cases}$$
(2.82)

где сумма $\sum_{j',j} |I_{jj'}^{(v)}|^2$ определена формулой (2.64) и обусловлена непараболичностью законов дисперсии носителей заряда [33].

2.2.5.2 Метод Брукса-Херринга

В приближении Брукса-Херринга проблема расходящегося сечения рассеяния кулоновского потенциала решается с помощью использования в качестве потенциала возмущения экранированного кулоновского потенциала Томаса-Ферми [33; 105]:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{Ze}{\kappa_0 r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right)$$
(2.83)

В [33; 95] показано, что вероятность перехода в этом случае определяется выражением:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_{\mathrm{I}}}{V} \left(\frac{4\pi Z e^2}{\kappa_0}\right)^2 \frac{\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'})}{\left((\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 + r_0^{-2}\right)^2} \sum_{j',j} \left|I_{jj'}^{(\nu)}\right|^2$$
(2.84)

где сумма $\sum_{j',j} |I_{jj'}^{(v)}|^2$ определена формулой (2.64), величина r_0 – радиус экранировки (2.72).

Следует отметить, что формула (2.84) переходит в формулу (2.82) если положить $r_0 = 0$.

2.2.5.3 Метод исключения третьего тела

В методе Брукса-Херринга не учитывается, что рассеяние носителей заряда на примесном атоме это двух частичный процесс. Ридли предложил ввести весовой множитель [108], который определяет эту вероятность. Такой подход исключает следующую ситуацию: носитель заряда рассеивается на одном атоме примеси, при этом рядом имеется еще один примесный центр того же сорта, находящийся ближе к носителю, чем рассеивающий.

Указанный множитель, согласно [108], определяется следующим образом:

$$P(b) = \exp\left(-\pi N_{\rm I} a b^2\right) \tag{2.85}$$

где *а* – среднее межпримесное расстояние, *b* – прицельный параметр, который для модели Брукса-Херринга выглядит следующим образом [105]:

$$b^{2} = \frac{\frac{Z^{2}e^{2}}{4\kappa_{0}\varepsilon_{k}^{2}}\cos^{2}(\theta/2)}{\left[\sin^{2}(\theta/2) + (2kr_{0})^{-2}\right]\left[1 + (2kr_{0})^{-2}\right]}$$
(2.86)

Вероятность перехода (2.84), полученная методом Брукса-Херринга, с учетом исключения влияния третьего тела записывается в следующем виде:

$$W'(\mathbf{k},\mathbf{k}') = W(\mathbf{k},\mathbf{k}')P(b)$$
(2.87)

где $W'(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ – результирующая вероятность в методе исключения третьего тела, $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ – вероятность перехода, полученная методом Брукса-Херринга.

2.2.5.4 Метод сдвигов фаз. Правило сумм Фриделя

Методы Конуэлл-Вайскопфа и Брукса-Херринга, описанные выше, получены в борновском приближении. В области достаточно низких температур и высоких концентраций примесных атомов, борновское приближение становится неприменимым [33]. В диссертационной работе, аналогично [109], для описания рассеяния носителей заряда на ионизованных атомах примесей использовался метод фазовых сдвигов [111].

В работе [112] отмечено, что при расчете фазовых сдвигов для определения сечения рассеяния носителей заряда на ионизованных атомах примесей в полупроводниках с непараболичной зоной достаточно ограничиться приближением эффективной массы, что существенно упрощает численные вычисления. В этом случае уравнение Шрёдингера для волновой функции ψ электрона или дырки с эффективной массой *m* в присутствии потенциала $U(\mathbf{r})$ может быть записано в следующем виде:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$
(2.88)

Для радиально-симметричного потенциала Томаса-Ферми (2.83), который использовался при вычислениях, функция у представима в виде:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l,m} \Re_{lm} S_l(\mathbf{r}) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$
(2.89)

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ – сферические функции, $S_l(r)$ – функции, определяющие зависимость ψ от r, \Re_{lm} - численные коэффициенты. Далее, перейдя к новой переменной x = kr, вводя новую функцию $R_l = xS_l$ и используя (2.89), уравнение (2.88) преобразуется к виду:

$$-\frac{\partial^2 R_l}{\partial x^2} + \left(\frac{l(l+1)}{x^2} + \tilde{U}(x) - 1\right) R_l = 0$$
(2.90)

В уравнении (2.90) введено обозначение $\tilde{U}(x) = U(r)/\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

Решение уравнения (2.90) в отсутствии потенциала $U(\mathbf{r})$ записывается следующим образом[109; 111]:

$$R_{l} = x \left(A_{l} j_{l}(x) + B_{l} n_{l}(x) \right) \xrightarrow[x \to \infty]{} x \sin \left(x - \frac{\pi l}{2} \right)$$
(2.91)

где $j_i(x)$ и $n_i(x)$ – сферические функции Бесселя.

В формуле (2.91) следует положить $B_l = 0$, для удовлетворения начальных условий (функции R_l/x должна быть конечна в нуле) [109].

В случае если $\tilde{U}(x)$ отлично от нуля, асимптотическое поведение решения уравнения (2.90), согласно [109; 111], представимо в виде:

$$R_{l} \xrightarrow[x \to \infty]{} x \sin\left(x - \frac{\pi l}{2} + \delta_{l}\right)$$
(2.92)

Под δ_l в (2.92) понимается сдвиг фаз, приобретенный носителем заряда в результате рассеяния. Дифференциальное сечение рассеяния, определяется через δ_l [111]:

$$\sigma(\theta) = \left| \frac{1}{k} \sum_{l} (2l+1) \exp(i\delta_{l}) \sin(\delta_{l}) P_{l}(\cos\theta) \right|^{2}$$
(2.93)

где *P*_l – полиномы Лежандра.

В диссертации уравнение (2.90) решалось численно с помощью метода Рунге-Кутта 4-го порядка. Следует также отметить, что сдвиги фаз δ_l не зависят от выбора начального условия в уравнении (2.90). Поэтому в качестве начального условия, для определенности, использовалось асимптотическое поведение решения уравнения (2.90) в близи нуля [109]:

$$R_l|_{x\to 0} \sim x^{l+1}$$
 (2.94)

Для нахождения сдвигов фаз использовались два метода:

 Согласно [113], сходимость решения уравнения (2.90) к асимптотическому выражению (2.92) достаточно медленная, поэтому было удобнее использовать следующее свойство [113]:

$$\delta_l = \lim_{x \to \infty} (x_r - y_r) \tag{2.95}$$

где x_r и $y_r - r$ -е корни сферической функции Бесселя $j_l(x)$ и решения $R_l(x)$ уравнения (2.90).

2. Второй метод вычисления основан на формуле [109]:

$$\exp(i\delta_l)\sin\delta_l = \int_0^\infty xR_l(x)j_l(x)\tilde{U}(x)dx \qquad (2.96)$$

Требованием к $R_i(x)$ в формуле (2.96) является нормировка максимального значения функции при достаточно больших *x* на единицу.

Проверка показала, что значения δ_l , полученные численно с помощью формул (2.95) и (2.96) совпадают с машинной точностью.

При вычислении дифференциального сечения рассеяния (2.93) мы ограничивались расчетом первых *L* = 64 сдвигов фаз. Критерием сходимости ряда в формуле (2.93) служило неравенство:

$$\frac{(2l_{\max}+1)\exp(i\delta_{l_{\max}})\sin(\delta_{l_{\max}})}{\sum_{l_{\max}}(2l+1)\exp(i\delta_{l})\sin(\delta_{l})} < 0,0001$$
(2.97)

В случае если при $l_{\text{max}} = L$ неравенство не выполнялось, сдвиги фаз с l > L рассчитывались в борновском приближении

$$\delta_l = \int_0^\infty x^2 j_l^2(x) \tilde{U}(x) dx$$
(2.98)

до тех пор пока не будет выполнено условие (2.97).

Сечение рассеяния, вычисленное с помощью формулы (2.93), существенным образом зависят от волнового вектора, эффективной массы носителя заряда и радиуса экранировки. Сравнение результатов работы [109] и расчетов, выполненных в диссертации в широком диапазоне изменения параметров, позволяет сделать вывод об адекватности выбранного в диссертации метода расчета.

Подход, основанный на решении уравнения (2.90), строго говоря, некорректен для описания рассеяния дырок валентной зоны (существенно для образцов р-типа), т.к. не учитывает спин-орбитальное взаимодействие и межзонные переходы при рассеянии. В работах [114; 115; 116] приведены различные решения данной проблемы. В диссертации, согласно [115], с помощью предложенного выше алгоритма для дырок рассчитаны внутризонные сечения рассеяния, межзонные же не вычислялись и при рассмотрении образцов р-типа учитывались с помощью теории Брукса-Херринга (см. пункт 5 второго параграфа главы 2).

Радиус экранировки ионизованного атома, входящий в формулу (2.83) в общем случае зависит от типа и заряда примесного центра [109]. Поэтому, формула (2.72) требует уточнения. Вычисленные фазовые сдвиги позволяют использовать для этого уточнения правило сумм Фриделя [104; 109; 117]. В работе [109] получено следующее уравнение, позволяющее находить радиус экранировки:

$$Z = -\frac{2}{\pi} \sum_{i} q_{i} \int_{0}^{\infty} f_{0}^{(i)}(z) \left(1 - f_{0}^{(i)}(z)\right) \sum_{l} (2l+1) \delta_{l}\left(r_{0}^{PS}\right) dz$$
(2.99)

В формуле (2.99) суммирование по *i* ведется по всем типам носителей, q_i – заряд *i*-го носителя, $f_0^{(i)}(z)$ – равновесная функция распределения *i*-го носителя, $z = \varepsilon_k / k_b T$, r_0^{PS} – искомый радиус экранирования. Уравнение (2.99) – интегральное уравнение, позволяющее найти радиус экранировки r_0^{PS} , в диссертационной работе оно решалось численно, с помощью метода Брента [80].

2.2.5.5 Электрон-дырочное рассеяние

Рассеяние электронов проводимости на дырках валентной зоны по своей сути очень похоже на рассеяние носителя заряда на атоме ионизованной примеси [86; 105]. В InSb этот механизм является особенно важным при высоких температурах [118]. По оценке работы [118] неучет рассматриваемого механизма приводит к ошибке в расчете подвижности InSb ~ 40 %.

Из-за большого отношения масс электрона и «тяжелой» дырки, согласно [86; 105], последнюю можно считать неподвижной и рассматривать рассеяние в приближении упругости взаимодействия. В этом предположении для вероятности рассеяния электрона использовались подходы, предложенные выше. Под *N*_I в формулах следует понимать концентрацию «тяжелых» дырок.

2.2.6 Рассеяние на короткодействующем потенциале

Рассмотренные в предыдущем подпараграфе подходы описания рассеяния носителей заряда на ионизованных атомах примесей не учитывают рассеяние электронов и дырок на атомном остове примеси, которое обусловлено различием в электроотрицательности и размерах атомов примесного и основного вещества. Это упругий механизм рассеяния важен в

69

сильнолегированных полупроводниках и объясняет зависимость кинетических коэффициентов от типа допирующих атомов [119; 120].

Вероятность перехода при рассеянии носителя на рассматриваемом потенциале определяется выражением [121]:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \int u_{\mathbf{k}}^* V_{sr}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'} \exp(i\{\mathbf{k}-\mathbf{k}'\}\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \cdot \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}}-\varepsilon_{\mathbf{k}'})$$
(2.100)

где u_{k} – блоховские функции, определяемые равенствами (2.6) – (2.7), $V_{sr}(\mathbf{r})$ – короткодействующий потенциал.

Согласно [121] рассматриваемый короткодействующий потенциал $V_{sr}(\mathbf{r})$ обладает следующими свойствами:

- Для кристаллов типа InSb (пространственная группа T_d) матричные элементы потенциала $V_{sr}(\mathbf{r})$ между волновыми функциями S и P симметрии равны нулю.
- $V_{sr}(\mathbf{r})$ убывает достаточно быстро (радиус действия меньше постоянной кристаллической решетки), что позволяет заменить $\exp(i\{\mathbf{k} \mathbf{k}'\}\mathbf{r})$ на 1.

В указанных предположениях для описания взаимодействия носителей с короткодействующим потенциалом достаточно ввести две константы [121; 122]:

$$A = \langle S | V_{sr} | S \rangle$$

$$B = \langle P_i | V_{sr} | P_i \rangle$$
 (2.101)

Кроме того, при рассеянии на ионизованном атоме примеси, следует учесть интерференцию дальнодействующего кулоновского и короткодействующего потенциалов [121]:

$$W(\mathbf{k},\mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \begin{cases} \left| \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{sr} \left| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle \right|^{2} + \left| \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{c} \left| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle \right|^{2} + \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{sr} \left| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle^{*} \times \right] \right. \\ \left. \times \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{c} \left| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle + \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{c} \left| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle^{*} \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{sr} \left| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle \right. \right. \right. \end{cases} \right\} \right\} \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \quad (2.102)$$

(2.102) – вероятность Первый член В формуле рассеяния на короткодействующем потенциале, второй на кулоновском, третий и четвертый – слагаемые отвечающие за интерференцию указанных потенциалов.

В работах [121; 123] для рассматриваемого механизма рассеяния получены выражения, определяющие временя релаксации электронов проводимости. В диссертации помимо электронов проводимости также рассмотрены межзонные переходы и рассеяние «тяжелых» дырок. Вычисление вероятностей выполнялось аналогично (2.16) – (2.18). Ниже приведены результаты расчетов для электронов проводимости и «легких» дырок:

$$\left| \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{sr} \right| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle \right|^{2} = \left[\left(Aa^{2} + B(c^{2} + b^{2}) \cos \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right)^{2} + B^{2} \left(2\sqrt{2}c - b \right)^{2} \frac{b^{2} \sin^{2} \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{4} \right]$$
(2.103)

Выражение для матричного элемента «тяжелых» дырок получено аналогично (2.103):

$$\left|\left\langle\psi_{\mathbf{k}}\left|V_{s}\right|\psi_{\mathbf{k}'}\right\rangle\right|^{2} = \frac{B^{2}\left(1+3\cos^{2}\theta_{k}\right)}{4}$$
(2.104)

Для межзонных переходов, учитывая (2.6) и (2.7), справедливо:

$$\left|\left\langle\psi_{\mathbf{k}}\left|V_{s}\right|\psi_{\mathbf{k}'}\right\rangle\right|^{2} = B^{2} \frac{\left(\sqrt{2}c+b\right)^{2} \sin^{2}\theta}{4}$$
(2.105)

Как упоминалось выше при совместном рассеянии на колуновском и короткодействующем потенциале необходимо учесть интерференцию механизмов. Ниже приведены выражения отвечающие за интерференцию указанных механизмов (для определенности при рассеянии на кулоновском потенциале использовался подход Брукса-Херринга).

Для электронов проводимости и «легких» дырок было получено:

$$\langle \psi_{\mathbf{k}} | V_{s} | \psi_{\mathbf{k}'} \rangle^{*} \langle \psi_{\mathbf{k}} | V_{c} | \psi_{\mathbf{k}'} \rangle + \langle \psi_{\mathbf{k}} | V_{s} | \psi_{\mathbf{k}'} \rangle \langle \psi_{\mathbf{k}} | V_{c} | \psi_{\mathbf{k}'} \rangle^{*} = \frac{Ze}{4k^{2} \sin^{2} \frac{\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{2} + q_{0}^{2}} \left\{ \left[Aa^{2} + B(c^{2} + b^{2}) \cos \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right] \right\}$$

$$\times \left[a^{2} + (c^{2} + b^{2}) \cos \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right] + B\left(\sqrt{2}c - \frac{b}{2} \right)^{2} b^{2} \cos^{2} \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} + B\left(\sqrt{2}c - \frac{b}{2} \right)^{2} b^{2} \sin^{2} \theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \right\}$$

$$(2.106)$$

Для «тяжелых» дырок, аналогично (2.106):

$$\left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{s} \right| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle^{*} \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{c} \right| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle + \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{s} \right| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{c} \right| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle^{*} = \frac{ZeB}{4k^{2} \sin^{2} \frac{\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{2} + q_{0}^{2}} \frac{1 + 3\cos^{2} \theta_{k}}{4} \quad (2.107)$$

Выражение для межзонных переходов выглядят следующим образом:

$$\left| \left\langle \psi_{\mathbf{k}} \left| V_{s} \right| \psi_{\mathbf{k}'} \right\rangle \right|^{2} = \frac{ZeB}{4k^{2} \sin^{2} \frac{\theta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{2} + q_{0}^{2}} \frac{\left(\sqrt{2}c + b\right)^{2} \sin^{2} \theta}{4}$$
(2.108)

Проверка показала, что время релаксации для электронов проводимости, вычисленное с помощью формул (2.103) и (2.106), идентично соответствующим выражениям из работы [123].

Параметры, используемые в вероятностях перехода, описанные в параграфе 2.2, приведены в таблице 3.
Таблица 3. Параметры, использованные для вычисления вероятности рассеяния носителей заряда на колебаниях решетки

ρ	5,775 см ³ /г	[4; 5]
a_0	0,648 · 10 ⁻⁷ см	[4; 5]
$\hbar\omega/k_{ m b}$	274 K	[4; 5]
κ_{∞}	15,68	[5]
К 0	18,00	
d_0	34,8 эВ	[97]
d_1	5,0 эВ	
С	-9,5 эВ	[10; 124]
l	-14,1 эВ	
т	-4,73 эВ	
n	-3,9 эВ	
$ u_{\parallel}$	3,7·10 ⁵ см/сек	[4; 5]
v_{\perp}	2,3·10 ⁵ см/сек	
e_{14}	$2,38 \cdot 10^4$ дин $^{1/2}$ /см	[8]
одействия $A(Te) = 0,7 \cdot 10^{-21} \ эB \cdot cm^3$		
A(Se)	$2,8\cdot10^{-21}$ $3B\cdot cm^{3}$	[122]
A(S)	4,7 \cdot 10 ⁻²¹ эВ \cdot см ³	
B/A (Te)	0,95	
B/A (Se)	0,92	
B/A (S)	0,98	
	$ $	ρ $5,775 \text{ cm}^3/\text{r}$ a_0 $0,648 \cdot 10^{-7} \text{ cm}$ $\hbar \omega/k_{\rm B}$ 274 K κ_{∞} $15,68$ κ_0 $18,00$ d_0 $34,8 \Rightarrow B$ d_1 $5,0 \Rightarrow B$ d_1 $5,0 \Rightarrow B$ l $-14,1 \Rightarrow B$ m $-4,73 \Rightarrow B$ n $-3,9 \Rightarrow B$ ν_{\parallel} $3,7 \cdot 10^5 \text{ cm/cek}$ ν_{\perp} $2,3 \cdot 10^5 \text{ cm/cek}$ v_{\perp} $2,3 \cdot 10^5 \text{ cm/cek}$ $k_{(Te)}$ $0,7 \cdot 10^{-21} \Rightarrow B \cdot \text{cm}^3$ $A(S)$ $4,7 \cdot 10^{-21} \Rightarrow B \cdot \text{cm}^3$ $B/A (Te)$ $0,95$ $B/A (S)$ $0,98$

Глава 3. Результаты расчетов кинетических коэффициентов антимонида индия *n*-и *p*-типа

В главе обсуждается выбранная физическая модель, и приводятся результаты расчетов температурных и концентрационных зависимостей основных кинетических коэффициентов µ, σ, s, R и к_e для InSb n- и p-типа, полученных с помощью численного метода, описанного в первой главе, и моделей, рассмотренных во второй главе. Вычисления проводились на Многоцелевом вычислительном комплексе НИЦ «Курчатовский институт» [85] с помощью разработанного программного комплекса CCTS Solver (подробнее см. параграф 3 первой главы).

3.1 Обсуждение физической модели

В параграфе уточняется выбор физической модели, описывающей свойства зонной структуры носителей заряда и механизмов рассеяния электронов и дырок.

Во второй главе приведена модель зонной структуры носителей заряда и рассмотрены основные механизмы рассеяния, определяющие электронный транспорт в InSb. Для описания структуры зон InSb предложено использовать изотропную модель, разработанную Кейном, которая достаточно точно воспроизводит законы дисперсии электронов и дырок вблизи Г-точки [33], области зоны Бриллюэна критически важной при расчете кинетических коэффициентов прямозонных полупроводниковых соединений. Данная модель, в отличие от простой параболической модели, позволяет учитывать взаимодействие зоны проводимости с валентными зонами, которое существенно в узкозонных полупроводниках типа InSb. Более сложные вычисления энергетического спектра с использованием современных численных методов избыточны, ввиду того, что электронный

транспорт полупроводников определяется носителями сосредоточенными вблизи минимумов энергии [32].

Модели рассеяния носителей заряда на фононах, приведенные в параграфе 2 второй главы, учитывают непараболичность закона дисперсии, которая важна в узкозонных соединениях, и позволяют корректно включать в расчет тип волновых функций электронов и дырок. Использование выбранных моделей обеспечивает необходимую точность для сравнения расчетных и экспериментальных данных.

Во второй главе рассмотрены несколько моделей, описывающих носителей примесей. рассеяние заряда на атомах ионизованных В большинстве работ расчету коэффициентов ПО кинетических полупроводников примесное рассеяние учитывается с помощью модели Брукса-Херринга или модели Конуэлла-Вайскопфа. Аналитические выражения для вероятности рассеяния носителей, полученные в этих моделях, удобно использовать в вычислениях. Борновское приближение, на котором они основаны, применимо, в случае, когда имеет место неравенство [125]:

$$|U| \ll \frac{\hbar^2}{mr^2} \tag{3.1}$$

где |U| – величина рассеивающего потенциала, r – радиус его действия, m – масса налетающей частицы. Выражение (3.1) справедливо в области высоких температур. При низких температурах задачу рассеяния необходимо решать точно, например, с помощью метода фазовых сдвигов [111]. Метод фазовых сдвигов с точки зрения численных вычислений достаточно трудоемок и требует больших вычислительных времен на ЭВМ. Ниже проведено сравнение результатов расчетов вклада в подвижность рассмотренных моделей. Сравнение проводилось для определения областей температур и концентраций примесей, в которых более простые с вычислительной точки

зрения модели, основанные на борновском приближении, обеспечивают ту же точность, что и метод фазовых сдвигов.

На рис. З приведена концентрационная зависимость отношения вкладов в подвижность от рассеяния на атомах ионизованных примесей, вычисленных по трем различным моделям, к подвижности μ_{ps} , рассчитанной с помощью метода фазовых сдвигов, при различных температурах.

Подвижность μ_{cw} образцов n-типа, вычисленная с помощью модели Конуэлла и Вайскопфта, согласно рис. 3 (a), (c), (e), примерно в два раза меньше значений μ_{ps} при рассматриваемых температурах. Для образцов ртипа (см. рис. 3 (b), (d), (f)) наблюдается похожая картина, за исключением области концентраций N_a < 10¹⁵ см⁻³ при 77 K, в которой отношение подвижностей μ_{cw} и μ_{ps} больше единицы.

Для образцов n-InSb вклад в подвижность μ_{bh} , рассчитанный в модели Брукса-Херринга, заметно отличается от μ_{ps} в области слабого легирования при низких температурах. При комнатных температурах разница рассматриваемых подходов несущественна при любой концентрации примесей. Для образцов р-типа подвижности μ_{ps} и μ_{bh} сильно отличаются друг от друга при всех рассматриваемых температурах. При T = 10 K (см. Рис 3 (b)) наблюдается характерная немонотонность отношения подвижностей μ_{bh}/μ_{ps} . Похожая концентрационная зависимость была получена для кремния р-типа при низких температурах авторами работы [109].

Корректировка вероятности рассеяния Брукса-Херринга (2.84) с помощью метода исключения третьего тела (2.87), предложенного Ридли, как и следовало ожидать, во всей области температур незначительно увеличивает подвижность μ_{bh} , поэтому концентрационная зависимость отношения μ_{ridli}/μ_{ps} несильно отличается от μ_{bh}/μ_{ps} .



Рис. 3. Концентрационная зависимость отношения подвижностей μ_i / μ_{ps} . N_d и N_a - концентрации донорных и акцепторных атомов. 1 – отношение μ_{bh} , вычисленной с помощью модели Брукса-Херринга, к μ_{ps} , рассчитанной в модели Брукса-Херринга, 2 - отношение μ_{ridli} , рассчитанной по модели Ридли, к μ_{ps} , 3 – отношение μ_{cw} , вычисленной с помощью метода Конуэлл-Вайскопфа к подвижности μ_{ps}

Сравнение расчетных данных для вкладов примесного рассеяния в подвижность, проведенное выше, показывает, что учет рассеяния на примесных атомах с помощью моделей Брукса-Херринга и Конуэл-Вайскопфа приводит к существенному отклонению при вычислениях кинетических коэффициентов образцов p-InSb от результатов, полученных с помощью метода фазовых сдвигов. Использование модели Брукса-Херринга для n-InSb оправдано при температурах выше азотной.

С учетом вышесказанного рассеяние на примесных атомах нами учитывалось следующим образом: при моделировании низкотемпературных кинетических свойств InSb n- и p-типов для расчета использовался метод фазовых сдвигов, в области температур выше 300 К для образцов p-типа также использовался метод фазовых сдвигов, а для образцов n-типа использовалась модель Брукса-Херринга.

Отметим также, что формула (2.72) для расчета радиуса экранирования примесного атома получена в борновском приближении, поэтому при вычислениях подвижности μ_{PS} радиус экранирования рассчитывался с использованием правила сумм Фриделя (см. Параграф 2 второй главы). Проведенные расчеты показывают, что отношение радиусов экранирования r_0 и r_{Fr} для образцов n- и р-типа, вычисленных по формуле (2.72) и с помощью правила сумм Фриделя (2.99), существенно отличается от единицы только в области низких температур T < 20 К. На рис. 4 представлена концентрационная зависимость отношения r_{Fr}/r_0 при T = 10 К.



Рис. 4. Зависимость отношения радиусов экранирования, вычисленных с помощью правила Фриделя (2.99) и формулы (2.72), от концентрации ионизованных атомов примеси $N_{\rm I}$ при температуре 10 К. 1 – n-InSb, 2 – p-InSb.

3.2 Подвижность

В параграфе приведены расчеты подвижности электронов и дырок в широкой области температур и концентраций, проведено сравнение расчетных и экспериментальных данных. Рассмотрено влияние основных механизмов рассеяния на величину подвижности.

Отличительной особенностью антимонида индия, как уже отмечалось во введении, являются рекордные значения электронной подвижности μ_{e} . В

связи с этим имеется достаточное количество как экспериментальных, так и теоретических работ по измерению и расчету величины μ_{e} .

Важной характеристикой образцов *n*- и *p*-типа являются концентрации допирующих донорных $N_{\rm d}$ и акцепторных атомов $N_{\rm a}$, которые определяют концентрацию носителей заряда в области низких температур И интенсивность рассеяния электронов и дырок на примесных атомах. Обычно разность N_d – N_a в исследуемых образцах определяется при низких температурах с помощью данных по измерениям коэффициента Холла посредством формулы (1.36). Численные значения множителя $r_{\rm H}$, входящего в формулу (1.36), авторами экспериментальных работ выбирается из интервала от 1 до 2. Если измерения производятся в слабых магнитных полях и слаболегированных образцах, безразмерный коэффициент r_н кладут $315\pi/512$ [33; 110]. Данное равным значение используется для невырожденных полупроводников при рассеянии носителей заряда с параболическим законом дисперсии на ионизованных примесных атомах [33], основном механизме рассеяния при низких температурах [32; 62]. В сильных магнитных полях $r_{\rm H} = 1$ [33; 110]. Компенсация $K = N_{\rm d}/N_{\rm a}$ обычно определяют из анализа низкотемпературных экспериментальных данных холловской подвижности с помощью формулы Брукса-Херринга [110]:

$$\mu = \frac{8\kappa_0^2 \sqrt{2} (k_{\rm B}T)^{\frac{3}{2}}}{N_{\rm I} e^3 \sqrt{m\pi^3} \ln\left(\frac{24mk_{\rm B}T}{\hbar^2} r_0^2\right)}$$
(3.2)

Описанный выше подход определения N_d и N_a не всегда является корректным вследствие следующих соображений:

 В невырожденных полупроводниках для носителей заряда с непараболичным законом дисперсии r_H ≠ 315π/512. При использовании формулы Брукса-Херринга для полупроводников типа InSb необходимо учитывать непараболичность закона дисперсии носителей заряда.

По указанным выше причинам в диссертации определение концентраций примесных атомов проводилось иначе. Величины N_d и N_a находились из равенства экспериментальных рассчитанных условия И значений коэффициента Холла *R* и холловской подвижности $\mu_{\rm H}$ при температуре 30 К для низкотемпературных вычислений и 77 К для вычислений при азотной температуре и выше. Для апробации рассматриваемого численного метода выбирались которых имеются эксперименты, для измерения, как коэффициента R, так и $\mu_{\rm H}$ (или проводимости, т.к. $\mu_{\rm H} = R\sigma$).

Одной из целей диссертации является исследование влияния основных механизмов рассеяния на кинетические коэффициенты. Для величины обратной к подвижности, согласно [62], существует аналог правила Матиссена об аддитивности удельного сопротивления. Поэтому при расчетах подвижности для анализа влияния различных механизмов рассеяния на μ_e были проведены вычисления, в которых учитывался только один из механизмов рассеяния, перечисленных в параграфе 2 второй главы.

На рис. 5 приведена температурная зависимость холловской подвижности электронов μ_e в области низких температур, а также парциальные вклады в μ_e различных механизмов рассеяния носителей заряда, рассмотренных в Главе 2. При низких температурах μ_{e} определяется, главным образом, рассеянием на ионизованных атомах примесей. В интервале от 4 до 100 К данный механизм преобладает над остальными. Начиная со 100 К, становится существенным рассеяние на полярных оптических фононах, роль которого с ростом температуры возрастает. Вклад остальных механизмов рассеяния в рассматриваемой области температур так же пренебрежимо мал. Следует отметить, хорошее выполненных расчетов с что согласие

экспериментальными данными наблюдается во всем диапазоне за исключением температур ниже 20 К (см. рис. 5).



Рис. 5. Температурная зависимость холловской подвижности n-InSb для N_d – $N_a = 9.8 \cdot 10^{14}$ см⁻³ при температурах ниже 100 K и B = 6000 Гс. Сплошная линия - расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния. Точки, соединенные штриховыми линиями – расчет с учетом одного механизма рассеяния носителей заряда: 1 - деформационный акустический потенциал, 2 - пьезоакустический потенциал, 3 - деформационный оптический потенциал, 4 - полярные оптические фононы, 5 – ионизованные атомы примесей и «тяжелые» дырки; 6 - экспериментальные данные [38].

На рис. 6 приведены экспериментальные данные и расчетные кривые для нескольких образцов n-InSb с различной степенью компенсации *К*. Отклонение рассчитанных кривых от экспериментальных данных возрастает с увеличением *К*.



Рис. 6. Температурные зависимости холловских подвижностей образцов п-InSb с различными значениями $N_{\rm d} - N_{\rm a}$ и степенями компенсации $N_{\rm a} / N_{\rm d}$ в магнитном поле B = 230 Гс. Точки – экспериментальные данные [126] для $N_{\rm d}$ $- N_{\rm a} = 7 \cdot 10^{13}$ см⁻³ и $N_{\rm a}/N_{\rm d} = 0.67$ (1), $1.21 \cdot 10^{14}$ см⁻³ и 0.75 (2), $6.7 \cdot 10^{13}$ см⁻³ и 0.89(3), 10^{13} см⁻³ и 0.98 (4).

Согласно [127; 128], указанное расхождение В сильнокомпенсированных полупроводниках может быть объяснено неоднородностью распределения примесей. Флуктуации концентрации примесей обуславливают появление случайного потенциала, рассеяние носителей заряда на котором оказывается существенным в области низких температур. Кроме того, если полупроводник в процессе изготовления высокотемпературной обработке, расположение примесей подвергался коррелированным из-за кулоновского взаимодействия оказывается ионизованных доноров в момент кристаллизации [129]. Данная корреляция

может существенно влиять на характеристику случайного потенциала [130; 131]. В работах [132; 133; 134; 135; 136] рассмотрено несколько моделей, учитывающих данный тип рассеяния и позволяющих качественно объяснить температурные и концентрационные зависимости кинетических коэффициентов в области низких температур. Авторами работы [128] была получена оценка температуры, при которой вклад от рассеяния на случайном потенциале становится значимым:

$$\frac{1}{3} \left(\frac{\gamma}{\varepsilon_{T}}\right)^{2} \le 1$$
(3.3)

где ε_T – тепловая энергия электрона, а среднеквадратичное значение γ случайного потенциала, возникающего вследствие примесных флуктуаций, определяется формулой:

$$\gamma = 4\pi N_{\rm I} r_0 e^4 / \kappa_0^2 \tag{3.4}$$

В формуле (3.4) $N_{\rm I}$ – суммарная концентрация примесей, r_0 – радиус экранировки (см. формулу (2.72)), e – элементарный заряд, κ_0 – статическая диэлектрическая проницаемость. На рис. 6 стрелками на расчетных кривых отмечены точки, для которых справедливо равенство $1/3(\gamma/\varepsilon_T)^2 = 1$. В этих точках, согласно модели, предложенной в [128], существенным становится рассеяние на случайном потенциале. Из рис. 6 видно, что расхождение экспериментальных и расчетных данных начинается в районе указанных точек, что подтверждает приведенные предположения о влиянии на подвижность флуктуаций распределения примесей.

Результаты расчетов холловской подвижности дырок μ_h в образцах ртипа приведены на рис. 7.



T, K

Рис. 7. Температурная зависимость холловской подвижности p-InSb для N_d $-N_a = 1.7 \cdot 10^{14}$ см⁻³ при температурах ниже 100 K и B = 6000 Гс. Сплошная линия - расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния. Точки, соединенные штриховыми линиями, – расчет с учетом одного механизма рассеяния носителей заряда: обозначения 1–5 — те же, что и на рис. 5; 6 — экспериментальные данные [137].

В области температур T < 100 К вклад рассеяния на ионизованных примесных атомах существеннее вкладов других механизмов. С ростом температуры в области выше 100 К определяющим становится рассеяние дырок на полярных оптических и на акустических фононах, причем рассеяние на последних вносит наибольший вклад в подвижность. Отметим, что в образцах n-типа акустические фононы в рассматриваемой области температур не оказывают сколь-нибудь существенного влияния на величину $\mu_{e.}$

На рис. 8 и 9 приведены концентрационные зависимости подвижностей электронов и дырок образцов n- и p-типа антимонида индия при азотной температуре.



Рис. 8. Зависимость холловской подвижности электронов от концентрации носителей при T = 77 К. Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния, обозначения 1-5 — те же, что и на рис. 5, 6, 7, 8, 9 — экспериментальные данные из работ [8; 120; 138].

В области низких концентраций вклад рассеяния на ионизованных атомах примесей в подвижности электронов и дырок несущественен. Величина подвижностей в данной области концентраций, главным образом, определяется рассеянием на полярных оптических и акустических фононах. Причем в образцах n-типа доминирующим механизмом является рассеяние на полярных оптических фононах, в то время как в p-InSb носители эффективнее рассеиваются на акустическом деформационном потенциале.



Рис. 9. Зависимость холловской подвижности дырок от концентрации носителей при T = 77 К. Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния, обозначения 1–5 — те же, что и на рис. 5, 6 – экспериментальные данные из работы [139].

С ростом концентрации примесей влияние рассеяния на ионизованных атомах возрастает. При концентрациях носителей больших, чем 10¹⁷ см⁻³ подвижность определяется примесных рассеянием и вклады от других механизмов практически не влияют на ее величину. Отметим хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных во всем диапазоне концентраций.

Данные экспериментов по измерению подвижностей электронов и дырок при комнатных температурах так же хорошо описываются в рамках рассматриваемой модели (см. рис. 10 и 11). Расчетные кривые близки к экспериментальным данным во всей рассматриваемой области концентраций носителей заряда. Определяющими парциальными вкладами механизмов рассеяния в подвижность электронов образцов n-типа, как и в случае азотных температур, являются рассеяние на акустическом деформационном потенциале, на оптических полярных фононах и на ионизованных атомах примесей.



Рис. 10. Зависимость холловской подвижности электронов от концентрации носителей при T = 300 K. Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния, обозначения 1–5 — те же, что и на рис. 5, 6 – экспериментальные данные из работы [120].

В n-InSb в области концентраций до 10^{17} см⁻³ подвижность определяется рассеянием на полярных оптических фононах. С ростом концентрации носителей заряда возрастает влияние примесного рассеяния и рассеяния на деформационном акустическом потенциале. Вклад от остальных механизмов рассеяния пренебрежимо мал.

В p-InSb основным механизмом рассеяния, определяющим подвижность дырок, вплоть до концентраций 10¹⁸ см⁻³ является рассеяние на акустическом деформационном потенциале.



Рис. 11. Зависимость холловской подвижности дырок от концентрации носителей при T = 290 К. Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов обозначения 1–5 — те же, что и на рис. 5, 6, 7, 8 – экспериментальные данные из работ [38; 140; 141].

Полярное оптическое рассеяние играет существенно меньшую роль по сравнению с подвижностью образцов n-типа. С ростом концентрации дырок возрастает значимость примесного рассеяния, которое, начиная с 10¹⁹ см⁻³, доминирует над остальными механизмами. Отметим, что в образцах p-типа вклад рассеяния на оптическом деформационном потенциале в области

сильного допирования существеннее вклада полярного оптического рассеяния, и этот вклад, в отличие от n-InSb, следует включать в рассмотрение.

На рис. 12 приведена зависимость электронной подвижности от температуры в области *T* > 200 K.



Рис. 12. Температурная зависимость холловской подвижности электронов при высоких температурах. Сплошная линия — расчет для недопированного InSb с учетом вкладов всех механизмов рассеяния, обозначения 1-5 — те же, что и на рис. 5, 6, 7, 8 – экспериментальные данные для различных значений $N_{\rm d} - N_{\rm a}$ [15; 142; 143].

На рисунке также приведены парциальные вклады в μ_e для различных механизмов рассеяния электронов. В данной области температур существенным является рассеяние на полярных оптических фононах, «тяжелых» дырках и на деформационном акустическом потенциале. Роль

рассеяния на деформационном оптическом и пьезоакустическом потенциалах в данной области температур и концентраций невелика. Отметим хорошее согласие экспериментальных данных и теоретических результатов во всей области температур.

Полученные диссертации результаты расчетов В подвижности образцов p-InSb электронов И дырок n-И хорошо согласуются с экспериментальными данными во всем рассматриваемом диапазоне температур и концентраций примесей, за исключением случая сильно компенсированных образцов в области низких температур T < 20 K, выше приведено возможное объяснение указанного расхождения. На основании сравнения экспериментальных и расчетных данных можно сделать вывод об адекватности выбранной физической модели.

Проведен анализ влияния вкладов различных механизмов рассеяния на величину подвижности электронов и дырок и выявлены доминирующие механизмы. При низких температурах в образцах п-и р-типа подвижность определяется рассеянием на примесных атомах, с ростом температуры возрастает роль рассеяния на полярных оптических и акустических фононах. В области высоких температур в n-InSb подвижность определяется, главным образом, полярным оптическим рассеянием и в меньшей степени рассеянием электронов на «тяжелых» дырках и акустических фононах. Вклад в подвижность от рассеяния на пьезоакустическом и деформационном оптическом потенциалах в n-InSb пренебрежимо мал. В p-InSb основным деформационном механизмом является рассеяние на акустическом потенциале, также следует учитывать рассеяние на полярном И деформационном оптических потенциалах.

Авторами ряда работ также проводилось моделирование подвижностей InSb n- и p-типа, как с помощью вариационного метода [8; 90; 119; 120; 139; 144], так и с помощью численного решения кинетического уравнения [10; 127; 145]. В указанных работах авторы ограничивались изучением

определенной температурной и концентрационной области. Нами не было обнаружено детального исследования, охватывающего широкий диапазон температур и концентраций примесных атомов. Кроме того, в ряде работ для получения согласия с экспериментом использовалась процедура подгонки некоторых параметров, используемых в моделях. Результаты, полученные в цитированных выше работах и в диссертации, в целом согласуются.

В работах [8; 87; 90] был проведен анализ влияния основных механизмов рассеяния в подвижность n-InSb. Выводы, сделанные нами, аналогичны выводам авторов указанных работ – важно рассеяние на оптическом полярном, акустическом примесях и «тяжелых» дырках, потенциалах. Функциональные зависимости парциальных вкладов В подвижность от температуры и концентрации примесей, полученные в диссертации, качественно соответствуют результатам работ [8; 90; 146]. Некоторое численное расхождение расчетов парциальных вкладов В диссертации и в обсуждаемых работах может быть связано с подходом к решению и различиях в используемых физических моделях.

В образцах р-типа анализ влияния вкладов рассеяния был произведен авторами работ [139; 147]. Аналогично результатам указанных работ в диссертации сделан вывод об определяющей роли рассеяния на акустическом деформационном потенциале, на полярных оптических фононах и на примесных атомах. По оценке авторов [139; 147] влияние остальных механизмов рассеяния, включая рассеяние на оптическом деформационном потенциале, не существенно. По нашим результатам исключение из расчета рассеяния на оптическом деформационном потенциале в p-InSb при высоких концентрациях примесей приводит к ошибке в 10% (см. рис 9 и 11). Указанное расхождение в результатах расчета вклада рассеяния на оптическом деформационном потенциале может быть объяснено некорректным учетом типа волновых функций дырок в p-InSb авторами работ [139; 147].

3.3 Проводимость и эффект Холла

В параграфе приведены результаты расчетов проводимости и коэффициента Холла InSb n- и p-типа в широкой области температур, проведено сравнение расчетных и экспериментальных данных.

Проводимость σ и коэффициент Холла *R* образцов InSb n- и р-типа детально изучены в широкой области температур и концентраций примесных атомов [4; 5]. Во втором параграфе третьей главы обсуждался метод определения концентрации N_d и N_a допирующих донорных и акцепторных атомов, соответственно. Было отмечено, что для определения N_d и N_a достаточно двух экспериментов: измерения коэффициента Холла и подвижности (или проводимости). С учетом сказанного, из обнаруженных нами экспериментальных данных выбирались те результаты измерений, в которых для образцов имелись данные, как по эффекту Холла, так и по проводимости.

На рис. 13 и 14 приведены экспериментальные и рассчитанные температурные зависимости проводимости и коэффициента Холла четырех образцов антимонида индия n-типа с различными степенями легирования и компенсации. Ha температурной зависимости проводимости σ С относительно небольшими концентрациями допирующих атомов экспериментально обнаружен минимум [38] (рис. 13). Данная особенность хорошо воспроизводится в рамках использованной расчетной схемы. Наличие минимума у σ объясняется поведением вклада в проводимость электрон-фононного механизма рассеяния в области температур порядка температуры Дебая. Для больших концентраций при данных температурах проводимость обусловлена главным образом рассеянием носителей заряда на ионизованных атомах примесей, поэтому на температурной зависимости σ минимум отсутствует. При температурах T > 300 K все образцы обладают собственной проводимостью и имеют примерно одинаковые значения σ .

Коэффициент Холла в области температур ниже 100 К (см. рис. 14) практически не меняется с температурой, что объясняется чрезвычайно малой энергией активации донорных атомов и тем самым постоянной концентрацией электронов в данной области температур. Отметим хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных, как для коэффициента Холла, так и для проводимости во всей рассматриваемой области температур.



Рис. 13. Температурная зависимость проводимости образцов n-InSb для различных значений разности $N_d - N_a$ и компенсации $K = N_a / N_d$. Точки – экспериментальные данные [38] (1, 2), [15] (3), [148] (4) для $N_d - N_a = 6.7 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ и K = 0.34 (1), $1.16 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ и 0.49 (2), $1.04 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ и 0.58 (3) и $1.44 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ и 0.36 (4). Сплошные линии — расчетные кривые для соответствующих концентраций.



Рис. 14. Температурная зависимость коэффициента Холла образцов n-InSb для различных значений разности $N_d - N_a$ и компенсации $K = N_a/N_d$. Точки – экспериментальные данные [38] (1, 2), [15] (3), [148] (4) для $N_d - N_a =$ $6.7 \cdot 10^{14}$ ст⁻³ и K = 0.34 (1), $1.16 \cdot 10^{15}$ ст⁻³ и 0.49 (2), $1.04 \cdot 10^{16}$ ст⁻³ и 0.58 (3) и $1.44 \cdot 10^{16}$ ст⁻³ и 0.36 (4). Сплошные линии — расчетные кривые для соответствующих концентраций.

На рис. 15 приведены расчетные и экспериментальные данные для проводимости и коэффициента Холла двух образцов p-InSb. Кривые проводимости также имеют характерный минимум в районе температуры Дебая. Отметим, что кривая собственной проводимости (пунктирная линия на рис. 15) не отвечает минимальной проводимости, как это имеет место в германии и кремнии [31]. В области температур выше 150 К кривые проводимости p-InSb опускаются ниже значений для чистого образца.

Коэффициент Холла в образцах p-InSb меняет знак, что объясняется изменением типа проводимости. Для рассматриваемых образцов при температурах ниже 100 К не обнаружено существенного изменения величины коэффициента Холла (см. рис. 16), тем самым энергия активации акцепторных атомов в них невелика.



Рис. 15. Температурная зависимость проводимости образцов p-InSb для различных значений разности $N_a - N_d$ и компенсации $K = N_d / N_a$. Точки – экспериментальные данные [149] (1), [150] (2) для $N_a - N_d = 5.3 \cdot 10^{15}$ сm⁻³ и $K = 0.6 (1), 4.8 \cdot 10^{15}$ сm⁻³ и 0.67 (2). Сплошные линии — расчетные кривые для соответствующих концентраций. Пунктирная линия – рассчитанная проводимость чистого InSb.

В области ниже 200 К коэффициент Холла достаточно сильно зависит от величины магнитного поля. На рис. 17 приведена температурная зависимость коэффициента Холла при различных значениях внешнего магнитного поля *H*. Определение концентраций N_d и N_a проводилось при *H* = 9740 Гс. Анализируя результаты расчетов, приведенные на рис. 17, следует выделить две области температур: область температур до 170 К и область выше 170 К. В первой наблюдается существенное расхождение экспериментальных и расчетных данных, в то время как во втором диапазоне температур согласие удовлетворительное.



Рис. 16. Температурная зависимость коэффициента Холла образцов p-InSb для различных значений разности $N_a - N_d$ и компенсации $K = N_d / N_a$. Точки – экспериментальные данные [149] (1), [150] (2) для $N_a - N_d = 5.3 \cdot 10^{15}$ сm⁻³ и K = 0.6 (1), $4.8 \cdot 10^{15}$ сm⁻³ и 0.67 (2). Сплошные линии — расчетные кривые для соответствующих концентраций.

В работе [151] авторы, используя предложенный ими аналитический метод, провели оценку вкладов различных типов носителей заряда в эффект Холла p-InSb. В указанной работе было получено, что в области 100 К коэффициент

Холла определяется дырками, при этом вклады в *R* «легких» и «тяжелых» дырок примерно одинаковы. В области 170 К коэффициент Холла определяется, главным образом электронами, их вклад при данных температурах в *R* порядка 80 %.



Рис. 17. Температурная зависимость коэффициента Холла образца p-InSb с концентрацией $N_a - N_d = 5.3 \cdot 10^{15}$ см⁻³ при различных значениях напряженности внешнего магнитного поля. Точки — экспериментальные данные [149] для $H = 100 \ \Gamma c$ (1), 2162 Γc (2), 5840 Γc (3), и 9740 Γc (4). Сплошные линии — расчетные кривые для соответствующих полей.

С учетом результатов работы [151] и расхождения результатов расчета и эксперимента мы сделали вывод о необходимости корректировки физической модели, определяющей зонную структуру дырок и механизмы рассеяния. Одной из вероятных причин расхождения является использование

параболического изотропного приближения зонной структуры «тяжелых» дырок, закон дисперсии которых существенно анизотропен [35].

На рис. 18 и 19 приведены температурные зависимости проводимости и коэффициента Холла в области температур выше 250 К для образцов с различной степенью легирования. Из рис. 18 следует, что проводимость при нелинейна. высоких температурах Указанное поведение объясняется [31]. особенность вырождением электронного газа Данная хорошо воспроизводится в рамках расчетной модели. Отметим хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных вплоть до 700 К.



Рис. 18. Температурная зависимость проводимости InSb для различных значений разности $N_d - N_a$ при высоких температурах в области собственной проводимости. Сплошная линия — расчетная кривая, 1, 2, 3 – экспериментальные данные [15; 38].

Экспериментальные данные по коэффициенту Холла в области собственной проводимости также хорошо описываются расчетной моделью.



Рис. 19. Температурная зависимость коэффициента Холла для образцов с различными значениями разности $N_d - N_a$ при высоких температурах в области собственной проводимости. Сплошная линия — расчетная кривая, 1, 2, 3 – экспериментальные данные [38].

Результаты расчета проводимости и коэффициента Холла образцов n-InSb, полученные в диссертации, хорошо согласуются с экспериментальными результатами во всей области рассматриваемых температур. Нами выявлена природа наличия минимума на температурной кривой проводимости. Ранее подобное низкотемпературное поведение было численно получено в [9], но природа указанной особенности авторами не обсуждалась. Расчеты проводимости n-InSb и коэффициента Холла в [9] проводились с использованием подгоночных параметров: эффективной массы «тяжелых» дырок m_{hh} и температурной зависимости ширины запрещенной зоны ε_g . Величина m_{hh} , найденная в [9], примерно в два раза меньше значения, используемого нами в диссертации и приведенного в [4; 5; 91].

Расчеты проводимости для образцов p-InSb также достаточно близки к экспериментальным данным при всех рассматриваемых температурах. Расчетные данные для коэффициента Холла в области температур выше 170 К удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными. При температурах ниже 170 К, расхождение между экспериментальными и расчетными данными существенно, откуда нами был сделан вывод о необходимости уточнения физической, модели, описывающей дырки. Одной из возможных причин такого различия может случить неправомерность применения сферического приближения вместо анизотропного закона дисперсии «тяжелых» дырок. В известных нам литературных источниках работ по моделированию проводимости в образцах p-InSb найдено не было.

3.4 Термоэдс

В параграфе приведены результаты расчетов коэффициента термоэдс образцов InSb n- и p-типа, проведено сравнение расчетных и экспериментальных данных.

Коэффициент Зеебека антимонида индия n- и p-типа экспериментально исследован в широкой области температур и концентраций допирующих примесных атомов [4; 5]. Во введении к диссертации отмечалось, что в области низких температур T < 100 К существенное влияние на величину термоэдс оказывает увлечение носителей заряда фононами [44]. Для исследования влияния данного эффекта на транспортные свойства необходимо совместно решать кинетические уравнения Больцмана для носителей заряда и фононов [33]. При моделировании фононного транспорта

при низких температурах важную роль играют процессы переброса [152], для учета которых в расчетную схему необходимо включать анизотропию зоны Бриллюэна. Учет анизотропии существенно увеличивает вычислительную сложность решения уравнений, поэтому термоэдс исследовалась нами в области температур выше 100 К, где влияние увлечения носителей фононами несущественно.

На рис. 20 приведены расчетные и экспериментальные данные температурной зависимости коэффициента термоэдс s n-InSb при различных концентрациях примесных атомов при T > 100 K. Согласно рис. 20 во всей области температур величина s образов n-InSb отрицательна и с ростом концентрации примесей абсолютное значение s уменьшается. Отметим хорошее согласие расчетных и экспериментальных данных во всей области рассматриваемых температур.

Концентрационная зависимость термоэдс при комнатной температуре приведена на рис. 21. Из приведенных экспериментальных данных видно, что с ростом концентрации носителей величина абсолютного значения термоэдс уменьшается. Кроме того, термоэдс образцов n-InSb сильнолегированных атомами теллура отличается от термоэдс образцов, легированных до такой же концентрации носителей атомами селена и серы.



Рис. 20. Температурная зависимость термоэдс образцов n-InSb с различной концентрацией носителей. Точки – экспериментальные данные [146; 153] для концентраций носителей $5 \cdot 10^{15}$ см⁻³ (1), $2 \cdot 10^{16}$ см⁻³ (2), $1.25 \cdot 10^{17}$ см⁻³ (3), $9.6 \cdot 10^{17}$ см⁻³. Сплошные линии – расчетные кривые.

Согласно [154], механизмом рассеяния носителей заряда, отвечающим за зависимость величины термоэдс допирующих OT типа атомов В сильнолегированных полупроводниках, является рассеяние на короткодействующем потенциале. Данный механизм рассеяния рассмотрен в параграфе 2 второй главы. Полученные расчетные кривые для трех типов допирующих атомов с учетом указанного механизма хорошо описывают концентрационную зависимость, полученную экспериментально.



Рис. 21. Концентрационная зависимость термоэдс образцов n-InSb легированных Te, Se, S при T = 300 K. Точки – экспериментальные данные [155] (1), [42] (2, 3), [156] (4-7), [39] (8). Сплошная, штриховая и штрихпунктирная линии – расчетные кривые для n-InSb, легированного атомами Te, Se, S.

Поскольку для термоэдс аналога правила Матиссена об аддитивности удельного сопротивления не существует, с целью оценки степени влияния различных механизмов рассеяния носителей на *s* нами были проведены расчеты с исключением одного из механизмов рассеяния. Результаты, приведенные на рис. 22, указывают на то, что рассеяние на полярных оптических фононах и на ионизованных атомах примесей оказывает наиболее существенное влияние на величину *s* в n-InSb. Рассеяние на акустическом деформационном потенциале влияет на *s* в меньшей степени, а рассеяние на оптическом деформационном и пьезоакустическом потенциалах практически не влияет на *s* при T = 300 K.



Рис. 22. Зависимость термоэдс от концентрации допирующих примесей при *T* = 300 K. Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния носителей заряда; точки, соединенные штриховыми линиями без учета одного из механизмов рассеяния носителей заряда: 1 – без рассеяния на акустическом деформационном потенциале, 2 – без рассеяния на пьезоакустическом потенциале, 3 – без рассеяния на оптическом деформационном потенциале, 4 – без рассеяния на полярных оптических фононах, 5 – без рассеяния на ионизованных атомах примесей и «тяжелых» дырках.

Характерной особенностью температурной зависимости термоэдс образцов p-InSb является смена знака (см. формулу (B.11)). На рис. 23 приведены экспериментальные и расчетные данные для термоэдс *s* p-InSb в

области температур выше 100 К. Температура смены знака *s* зависит от степени легирования образца. Так для слаболегированного образца ($n_e = 6.7 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$) *s* меняет знак в районе 200 К, а для образца с концентрацией $1.4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ смена знака происходит при 450 К. В целом, отметим, хорошее согласие экспериментальных и расчетных данных. Расхождение для образца с $n_e = 6.7 \cdot 10^{15}$ в области T < 150 К может быть связано с влиянием эффекта увлечения или погрешностью измерений.



Рис. 23. Температурная зависимость термоэдс образцов p-InSb с различной концентрацией носителей. Точки – экспериментальные данные [41; 42] для концентраций носителей $6.7 \cdot 10^{15}$ см⁻³ (1), $5.3 \cdot 10^{16}$ см⁻³ (2), $3.2 \cdot 10^{17}$ см⁻³ (3), $1.4 \cdot 10^{18}$ см⁻³. Сплошные линии – расчетные кривые.

Сравнение расчетной кривой и имеющихся экспериментальных данных для концентрационной зависимости *s* в p-InSb при комнатной температуре представлено на рис. 24.



Рис. 24. Зависимость термоэдс от концентрации дырок p-InSb при T = 300К. Сплошная линия — расчетная кривая; 1-6 — экспериментальные данные [42; 156; 157; 158; 159].

Влияние различных механизмов рассеяния на величину термоэдс в р-InSb определялось аналогично n-InSb. На рис. 25 приведены расчеты *s* без учета одного из механизмов при комнатной температуре. Полученные результаты показывают, что в области относительно слабого легирования N_a $< 10^{17}$ см⁻³ величина термоэдс определяется рассеянием на полярных оптических фононах и ионизованных примесных атомах. При концентрациях $N_a > 10^{17}$ см⁻³ наиболее существенное влияние на величину *s* оказывает рассеяние на акустическом деформационном потенциале и на ионизованных атомах примесей. Как и в случае образцов n-InSb в области сильного легирования рассеяние на полярных оптических фононах не оказывает скольнибудь существенного влияния на величину термоэдс. Рассеяние на пьезоакустическом и деформационном оптическом потенциалах практически не влияет на *s* образцов p-InSb при T = 300 K.



Рис. 25. Зависимость термоэдс p-InSb от концентрации акцепторных атомов N_a при T = 300 K. Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния носителей заряда; обозначения 1-5 – те же, что и на рис. 22;

На рис. 26 приведена температурная зависимость коэффициента термоэдс образцов InSb в области собственной проводимости. Отметим хорошее согласие расчетной кривой и экспериментальных данных во всем температурном интервале.


Рис. 26. Температурная зависимость термоэдс образцов InSb в области собственной проводимости. Сплошная линия – расчетная кривая; 1 – 3 экспериментальные данные [15; 160; 161].

В области собственной проводимости наибольшее влияние на термоэдс оказывает рассеяние электронов на полярных оптических фононах и на «тяжелых» дырках (в области собственной проводимости расчет проводился для недопированного образца). Усиление влияния вклада от рассеяния носителей на «тяжелых» дырках обусловлено увеличением концентрации дырок c ростом температуры. Рассеяние на пьезоакустическом, деформационном акустическом И оптическом потенциалах В рассматриваемой области температур не оказывает заметного влияния на величину термоэдс.



Рис. 27. Температурная зависимость термоэдс образцов InSb в области собственной проводимости. Сплошная линия – расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния носителей заряда; обозначения 1–5 – те же, что и на рис. 22.

Полученные в диссертации результаты расчетов термоэдс образцов n- и p-InSb хорошо согласуются с экспериментальными данными во всем рассматриваемом диапазоне температур и концентраций примесей. В области высоких концентраций рассеяние на короткодействующем потенциале качественно правильно описывает зависимость величины термоэдс от типа допирующих атомов.

В ряде работ (см., например, [8; 10; 15; 90; 162]) авторы исследовали температурную и концентрационную зависимости термоэдс в InSb.

Полученные в диссертации результаты хорошо согласуются с результатами вычислений из работ [8; 10; 15; 90; 162]. Отметим, что в [163] для оценки влияния механизмов рассеяния носителей на величину термоэдс *s*, проводились вычисления *s* учетом одного механизма. Из-за отсутствия аналога правила Матиссена данный подход не позволял количественно оценить степень влияния механизмов и сделанные выводы носят только качественный характер.

В параграфе предложен метод оценки влияния различных механизмов рассеяния носителей заряда на величину термоэдс. Проведенный анализ выявил в образцах п-типа определяющую роль рассеяния на полярных оптических фононах и ионизованных примесных атомах. В образцах р-типа в области слабого легирования, аналогично результатам, полученным для образцов n-типа, определяющим является рассеяние на полярных оптических фононах ионизованных примесных В области И атомах. сильного легирования наиболее существенное влияние на величину *s* оказывает рассеяние на акустическом деформационном потенциале и на атомах ионизованных примесей.

3.5 Теплопроводность

В параграфе приведены результаты расчетов электронного вклада в теплопроводность антимонида индия в области высоких температур. Проведен анализ теплопроводности с выделением электронной и решеточной составляющих. Рассмотрено влияние основных механизмов рассеяния на величину электронного вклада в теплопроводность.

Теплопроводность κ антимонида индия экспериментально исследована в широком интервале температур [14; 15; 48; 164]. При рассмотрении κ выделяют два основных вклада в перенос тепла: от колебаний решетки и от свободных носителей заряда. В InSb в интервале температур T < 250 K решеточный вклад в κ много больше электронного [15; 48]. Моделирование динамики решетки выходит за рамки настоящей диссертации, поэтому при изучении κ мы ограничились областью температур T > 250 K, в которой наравне с фононным существенен и электронный вклад.

На рис. 28 приведены экспериментальные данные [15], электронные и фононные вклады в *к*, а также итоговая кривая для теплопроводности. В указанной области температур решеточная компонента с хорошей точностью описывается с помощью эмпирической формулы:

$$\kappa_{ph} = C/T^n , \qquad (3.5)$$

где C = 120 Вт/см и n = 1.15. Константы в формуле (3.5) были получены с помощью подгонки кривой по точкам, которые находились путем вычитания рассчитанного электронного вклада из экспериментальных точек полной измеренной теплопроводности. Возможными объяснениями отклонения показателя степени *n* в формуле (3.5) от единицы (степени характерной при доминировании трех-фононных процессов), согласно [152], являются возрастание влияния вклада В четырех-фононных процессов κ С температурой и особенности фононного спектра InSb. В области температур ниже 400 К теплопроводность рассматриваемого образца определяется решеточным вкладом, вклад носителей заряда в к не превышает 10 %. С ростом температуры влияние электронной подсистемы на теплопроводность увеличивается и при температурах плавления ее вклад составляет порядка 40 %.



Рис. 28. Температурная зависимость теплопроводности к образца n-InSb с $N_{\rm d} - N_{\rm a} = 1.2 \cdot 10^{16}$ см⁻³. Квадраты – экспериментальные данные [15]. Штрихпунктирная линия – решеточный вклад к_{ph} в к, полученный с помощью формулы (3.5). Штриховая линия – рассчитанный электронный вклад к_e в теплопроводность. Сплошная линия – расчетная кривая теплопроводности с учетом электронного и фононного вкладов.

Проведенные расчеты концентрационной зависимости электронного вклада κ_e в теплопроводность n-InSb показали, что при $N_d < 10^{16}$ cm⁻³ в области температур ниже 300 К κ определяется, главным образом, вкладом фононов (см. рис. 28 и 29). При более высоких концентрациях, как следует из рис. 29, увеличение N_d приводит к заметному росту κ_e и тем самым к увеличению κ . На рис. 29 приведена концентрационная зависимость парциальных вкладов в κ_e от различных механизмов рассеяния носителей

заряда. Основной вклад в κ_e вносят те же самые механизмы рассеяния, которые определяют и величину подвижности (см. рис. 10).



Рис. 29. Зависимость электронного вклада к_е в теплопроводность от концентрации донорных атомов N_d. Сплошная линия – расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния. Обозначения 1–5 – те же, что и на рис. 5.

Зависимость электронного вклада в теплопроводность p-InSb от концентрации акцепторных атомов N_a приведена на рис. 30. Отметим немонотонность полученной кривой. В области концентраций $N_a = 10^{18}$ см⁻³ имеется минимум, который объясняется поведением вклада от рассеяния на примесных акцепторных атомах в κ_e . Согласно рис. 30, во всей области концентраций также необходимо учитывать рассеяние на полярных оптических фононах и на деформационном акустическом потенциале, а в области сильного легирования на деформационном оптическом. Вклад в κ_e

рассеяния на пьезоакустическом потенциале во всем интервале допирующих атомов несущественен.



Рис. 30. Зависимость электронного вклада в теплопроводность от концентрации акцепторных атомов N_{a} . Сплошная линия — расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния. Обозначения 1–5 – те же, что и на рис. 5.

Непосредственного расчета электронного вклада κ_e с помощью (численного решения кинетического уравнения или С помощью вариационного метода) в теплопроводность InSb известных В нам литературных источниках найдено не было. Авторами работы [15] величина *к*_е оценена следующим образом: с помощью измерений подвижности и термоэдс был найден параметр рассеяния, определяющий зависимость времени релаксации от энергии носителя, и положение химического потенциала η в зависимости от температуры. Полученные величины

позволили оценить κ_e [33; 152]. Результаты вычислений κ_e , проведенные в диссертации, хорошо согласуются с результатами работы при T > 600 K, отклонение составляет не более 10 %. В области T < 600 K наблюдается существенное расхождение – величины κ_e различаются более чем в два раза. Данное расхождение может быть объяснено неправомерностью использования приближения времени релаксации в области температур $T \le \hbar \omega_{opt}$, в которой важную роль играет рассеяние на полярных оптических фононах.

Результаты анализа влияния различных вкладов на электронную часть теплопроводности InSb n- и p-типа, проведенного в параграфе, в целом соответствуют выводам, сделанным для подвижности: в образцах n-типа определяющими для κ_e являются вклады от рассеяния на полярных оптических фононах и атомах ионизованных примесей, меньшее влияние оказывает рассеяние на акустическом деформационном потенциале; в образцах p-типа наибольшее влияние на величину κ_e оказывает рассеяние на акустическом деформационном потенциале; в примесей.

Глава 4. Термоэлектрические свойства

B настоящей проанализированы главе термоэлектрические характеристики антимонида индия. Рассмотрено влияние различных рассеяния носителей заряда на эффективность механизмов преобразования термоэлектрического энергии. Выявлена природа особенностей в температурных и концентрационных зависимостях термоэлектрических свойств InSb n- и p-типа.

Антимонид индия не обладает высокими значениями коэффициента термоэлектрической добротности и не находит значимого применения в качестве рабочего материала в устройствах для термоэлектрического преобразования энергии, так как его характеристики уступают параметрам таких материалов как соединения Bi₂Te₃, PbTe или сплавы Ge-Si. Тем не менее, данные о температурных и концентрационных зависимостях коэффициентов InSb, рассчитанных третьей кинетических В главе диссертации, позволяют проанализировать вклад различных механизмов рассеяния носителей заряда в термоэлектрическую добротность и выявить те факторы, которые наиболее эффективность сильно влияют на термоэлектрического преобразования энергии.

Интегральной характеристикой кинетических свойств полупроводника является термоэлектрическая добротность [66]:

$$Z = \frac{\sigma s^2}{\kappa} = \frac{P}{\kappa} \tag{4.1}$$

где σ – проводимость, s – термоэдс, κ – теплопроводность, $P = s^2 \sigma$ - так называемый «Power factor». Безразмерная величина ZT определяет эффективность термоэлектрического преобразования энергии и чувствителена к физическим характеристикам образца [84].

Для определения направления поиска новых, более эффективных термоэлектрических материалов необходимо ответить на вопрос о том, какие

свойства полупроводниковых соединений и сплавов определяют высокие значения *Z*. Данный вопрос активно обсуждался ранее (см., например, [3; 64; 65; 66]).

В [66] для анализа температурной и концентрационной зависимостей кинетических коэффициентов использовалось τ-приближение. При этом был сделан ряд упрощающих предположений, в частности, предположение о малости электронной составляющей теплопроводности по сравнению с решеточной теплопроводностью для оптимальных концентраций носителей заряда, а также предположение о независимости теплопроводности решетки и подвижности от концентрации носителей заряда. Для нахождения оптимальных концентраций носителей заряда в полупроводнике данные упрощения позволили ограничиться рассмотрением числителя формулы (4.1) $P = s^2 \sigma$. В результате в [66] был сделан вывод о том, что максимальные значения Z должны наблюдаться у веществ с возможно большим отношением подвижности носителей заряда к теплопроводности кристаллической решетки при оптимальной концентрации носителей заряда.

Более подробно, но в рамках все того же τ -приближения, вопрос оптимизации значений Z рассматривался в обзорной статье [65]. Аналогично [66], предсказывалось наличие максимума в концентрационной зависимости P у несобственного полупроводника с носителями заряда одного знака, поскольку s по абсолютной величине уменьшается, а σ растет при увеличении концентрации носителей заряда. Но, в силу сложной функциональной зависимости кинетических коэффициентов от температуры и концентрации носителей заряда, указания на то, какие свойства должны иметь полупроводниковые материалы с целью достижения максимальных значений Z, были даны в [65] лишь в самом общем виде: желательно иметь высокие значения подвижности и эффективной массы носителей заряда, а также возможно меньшие значения фононной теплопроводности κ_{nb} .

Последняя рекомендация о необходимости уменьшения κ_{ph} для повышения значений *ZT*, по-видимому, реализуется в таких материалах как сплавы (AgSbTe₂)_{1-x}(GeTe)_x (так называемые, материалы типа TAGS (см. обзор [3])) и "скуттерудиты с заполнением" ("filled skutterudite") RM₄X₁₂ (R= La, Ce, Pr, Nd, Eu; M= Fe, Ru, Os; X= As, Sb) [165].

Особый интерес для исследования представляют соединения и сплавы элементов V группы, такие как Bi₂Te₃, Sb₂Te₃, Bi_{2-x}Sb_xTe₃, Bi-Sb, которые обладают лучшими термоэлектрическими свойствами В интервале температур 200 – 600 К. Выявление физико-химических свойств и определение легирующего действия примесей вместе С изучением транспортных свойств является в таких соединениях одной из ключевых задач для последующего поиска более эффективных полупроводниковых материалов.

Соединения Bi₂Te₃ и подобные ему имеют сложные анизотропные физические свойства, существенно усложняющие процесс вычисления кинетических коэффициентов. Использование результатов, полученных при моделировании кинетических свойств InSb, является одним из возможных подходов к выявлению свойств полупроводниковых соединений и сплавов, которые определяют высокие значения Z.

Для оценки влияния на P температуры и концентрации допирующих атомов были использованы расчеты концентрационной зависимости проводимости и термоэдс n-InSb в интервале температур от 77 до 780 K, проведенные в третьей главе. Поскольку для термоэдс аналога правила Матиссена об аддитивности удельного сопротивления не существует, с целью оценки степени влияния различных механизмов рассеяния носителей заряда на величину P были также проведены расчеты с исключением одного из перечисленных во второй главе диссертации механизмов рассеяния. На рис. 31 приведена зависимость P от концентрации донорных атомов N_d образцов n-InSb для нескольких значений температуры, а также результаты

расчетов *P* с исключением одного из механизмов рассеяния при T = 300 К. Из рис. 31 следует, что *P* увеличивается с ростом температуры. Кроме того, *P* как функция N_d имеет максимум, но лишь для температур ниже 500 К. Допирование в области концентраций $N_d > 10^{18}$ сm⁻³ для всех температур приводит к резкому падению *P*.



Рис. 31. Зависимость $P = \sigma s^2$ InSb от концентрации донорных атомов. Точки, соединенные штриховыми линиями, – расчет для T = 300 K без учета одного из механизмов рассеяния носителей заряда: 1-5 – то же, что на рис. 22. Точки, соединенные сплошными линиями – расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния для температур: 77 (6), 300 (7), 400 (8), 500 (9) и 700 K (10).

В области концентраций $N_{\rm d} < 10^{17}$ cm⁻³ исключение механизма рассеяния носителей на полярных оптических фононах оказывает наиболее сильное влияние на величину *P*. Следует подчеркнуть, что в области комнатных

температур данный механизм рассеяния существенным образом (примерно в четыре раза) уменьшает «Power factor» n-InSb.

На рис. 32 приведены результаты расчетов зависимости величины P от концентрации акцепторных атомов N_a образцов InSb.



Рис. 32. Зависимость $P = \sigma s^2$ InSb от концентрации акцепторных атомов. Точки, соединенные штриховыми линиями, – расчет для T = 300 K без учета одного из механизмов рассеяния носителей заряда: 1-5 – то же, что на рис. 22. Точки, соединенные сплошными линиями, – расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния для температур: 77 (6), 300 (7), 400 (8), 500 (9) и 700K (10).

В области концентраций $N_a < 10^{17}$ см⁻³, аналогично результатам, полученным для InSb допированного донорными атомами, с увеличением температуры наблюдается рост *P*. В области сильного легирования, ввиду более сложной концентрационной зависимости, *P* как функция температуры немонотонна.

Кривая, соответствующая азотной температуре, в районе концентрации 10¹⁸ CM^{-3} имеет пологий При максимум. остальных рассматриваемых зависимость Р от температурах концентрации сложнее: с ростом концентрации величина *P* сначала падает до нуля, а затем наблюдается рост. Такое поведение Р объясняется сменой знака термоэдс (см. рис. 25). В области легирования $N_{\rm a} < 10^{16}$ см⁻³ при 300 К в p-InSb, аналогично образцам n-типа, исключение механизма рассеяния на полярных оптических фононах оказывает наибольшее влияние на величину Р. Отметим также, что с ростом концентрации после точки смены знака термоэдс существенным оказывается рассеяние на деформационном акустическом потенциале.

На рис. 33 представлены экспериментальные данные [15] для температурной зависимости *ZT* n-InSb, содержащего $1.2 \cdot 10^{16}$ см⁻³ допирующих атомов, а также результаты расчетов *ZT* для трех концентраций N_d , одна из которых совпадала с вышеуказанной. Выбор концентраций N_d , для которых были выполнены расчеты, обусловлен тем, что при $N_d < 10^{18}$ сm⁻³ и при *T* > 400 K значения *ZT* отличаются друг от друга несущественно. Кроме того, приведены результаты расчетов *ZT* с исключением одного из механизмов рассеяния для концентрации $N_d = 1.2 \cdot 10^{16}$ см⁻³.

Из рис. 33 следует, что, в соответствии с результатами расчетов P, допирование InSb в области концентраций $N_d > 10^{18}$ cm⁻³ существенно понижает ZT. Наличие механизма рассеяния носителей заряда на полярных оптических фононах в InSb заметным образом уменьшает его термоэлектрическую эффективность во всем исследованном интервале температур. Однако, наибольшее влияние на ZT данный механизм рассеяния оказывает в области температур вблизи комнатной.

Качественно данный факт можно объяснить следующим образом. В изотропных полупроводниковых кристаллах типа InSb вероятность перехода при рассеянии носителей заряда на полярных оптических фононах обратно

пропорциональна диэлектрической проницаемости к^{*} кристалла и описывается формулой (2.63).



Рис. 33. Температурная зависимость ZT n-InSb. Точки, соединенные штриховыми линиями – расчет для $N_d = 1.2 \cdot 10^{16}$ см⁻³ без учета одного из механизмов рассеяния носителей заряда: 1-5 – то же, что на рис. 22. 6 – экспериментальные данные [15] ($N_d = 1.2 \cdot 10^{16}$ см⁻³), линии 7–9 – расчет с учетом вкладов всех механизмов рассеяния для концентраций $1.2 \cdot 10^{16}$ см⁻³, $5 \cdot 10^{18}$ см⁻³, $1 \cdot 10^{19}$ см⁻³, соответственно.

Величина к^{*}, входящая в (2.63), определяется следующим образом:

$$1/\kappa^* = 1/\kappa_{\infty} - 1/\kappa_0 \tag{4.2}$$

здесь κ_{∞} и κ_0 – высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости, соответственно. Для InSb значения высокочастотной и статической диэлектрической проницаемостей близки: $\kappa_{\infty} = 15,68$ и $\kappa_0 = 18,0$ [5]. Вследствие чего вероятность перехода (2.63) относительно велика.

В полупроводниковых соединениях элементов V группы Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $Bi_{2-x}Sb_xTe_3$, Bi-Sb, обладающих достаточно высокими значениями коэффициента термоэлектрической добротности в области комнатных температур, рассмотренный выше механизм рассеяния носителей заряда не является основным. Хотя формула (2.63) для количественного анализа кинетических свойств данных веществ не применима в силу анизотропии их кристаллических решеток, но качественно на основе (2.63) можно сделать предположение о подавлении механизма рассеяния носителей заряда на полярных оптических фононах в вышеуказанных соединениях ввиду аномально высоких значений диэлектрических констант, обусловленных большой электронной поляризуемостью входящих в состав атомов [166]. Так, например, для $Bi_2Te_3 \kappa_{\infty} = 84$ и $\kappa_0 = 100$ [167; 168].

Тем самым, известные в настоящее время массивные образцы полупроводниковых соединений и сплавов, обладающие наибольшими значениями термоэлектрической добротности [3], можно условно разбить на три группы:

- вещества с аномально низкой решеточной теплопроводностью *к*_{ph}, обусловленной разупорядочением кристаллической решетки;
- соединения и сплавы элементов V группы, обладающие большими значениями диэлектрических констант, связанных с высокой поляризуемостью входящих в состав атомов;
- Si-Ge сплавы, термоэлектрическая добротность которых растет при повышении температуры, и достигает больших значений вследствие высокой температуры плавления.

Заключение

В диссертации была разработана теоретическая модель, позволяющая с помощью численных методов исследовать транспортные свойства антимонида индия n- и p-типов. Теоретический подход основан на численном решении кинетического уравнения Больцмана, учете особенностей законов дисперсии носителей заряда и детальном рассмотрении механизмов рассеяния электронов и дырок.

Для реализации теоретической расчетной схемы разработан комплекс **«CCTS** Solver», основанный программ на итерационном решении Больцмана линеаризованного уравнения С привлечением методов распараллеливания программного кода. Разработанное программное обеспечение позволяет рассчитывать кинетические коэффициенты для различных условий постановки экспериментов. Пакет программ «ССТS Solver» может быть использован для исследования транспортных свойств широкого класса полупроводников путем изменения параметров физической модели.

Результаты расчетов кинетических коэффициентов n- и p-InSb, проведенные с помощью пакета программ «CCTS Solver», находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными, что свидетельствует об адекватности выбранной физической модели. В частности, был ряд особенностей наблюдаемых физических воспроизведен свойств: минимум температурной зависимости проводимости образцов *n*-InSb с относительно небольшими концентрациями допирующих атомов, смена знака термоэдс образцов *p*-InSb. Впервые численно рассчитан вклад электронной подсистемы в теплопроводность.

В диссертации предложен метод оценки влияния вкладов от различных механизмов рассеяния на эффективность термоэлектрического преобразования энергии. Выявлена существенная роль рассеяния носителей заряда на полярных оптических фононах в антимониде индия. Дано

качественное объяснение высоких значений термоэлектрической добротности полупроводниковых соединений элементов V группы Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 , $Bi_{2-x}Sb_xTe_3$, Bi-Sb, основанное на предположении о подавлении механизма рассеяния носителей заряда на полярных оптических фононах в данных соединениях.

Предложен критерий поиска новых эффективных термоэлектрических полупроводниковых материалов – большие значения диэлектрических констант.

Полученные результаты опубликованы в работах [67; 82; 169].

В заключение автор считает своим приятным долгом выразить глубокую признательность своему научному руководителю Орлову Валерию Георгиевичу за внимательное и чуткое руководство работой.

Автор благодарен сотрудникам лаборатории перспективных компьютерных систем и технологий за возможность использования вычислительных ресурсов Многоцелевого вычислительного комплекса НИЦ «Курчатовский институт».

Приложение 1

Рассмотрим уравнение (1.9):

$$\phi_{1}^{(i)}(\mathbf{k}) = \frac{\sum_{j} \int \phi_{1}^{(j)}(\mathbf{k}') \frac{\partial f_{0}^{(j)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos(\theta') F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos\theta}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos(\theta) \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}'} \qquad (\Pi 1.1)$$

Ввиду изотропности энергетического спектра носителей заряда и тензоров кинетических коэффициентов можно, не нарушая общности, предположить, что волновой вектор \mathbf{k} лежит в плоскости *xz* системы координат, в которой ось *z* направлена по полю **E**.

Далее, в интеграле, стоящем в числителе (П1.1), необходимо перейти в систему координат, в которой направление оси *z* совпадает с направлением вектора **k**. Для этого необходимо «повернуть» систему координат относительно оси *y* на угол θ (угол между **E** и **k**). Матрица поворота, характеризующая данное преобразование записывается в виде:

$$M = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix}$$
(II1.2)

Выражения, связывающие компоненты вектора k' в новой (x', y', z') и старой (x, y, z) системах координат, выглядят следующим образом:

$$\begin{pmatrix} k'_{x'} \\ k'_{y'} \\ k'_{z'} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} k'_{x} \\ k'_{y} \\ k'_{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k'_{x} \cos\theta + k'_{z} \sin\theta \\ k'_{y} \\ -k'_{x} \sin\theta + k'_{z} \cos\theta \end{pmatrix},$$
(II1.3)
$$\begin{aligned} k'_{x} &= k'_{x'} \cos\theta - k'_{z'} \sin\theta \\ k'_{y} &= k'_{y'} \\ k'_{z} &= k'_{x'} \sin\theta + k'_{z'} \cos\theta \end{aligned}$$
(II1.4)

Проверка показала, что для якобиана перехода справедливо (общее свойство такого рода преобразований):

$$\left|\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(x',y',z')}\right| = 1 \tag{\Pi1.5}$$

Тем самым, для интеграла, стоящего в числителе (П1.1), получим:

$$\sum_{j} \int ... \cos \theta' F_{ij} \left(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon \right) d\mathbf{k}' = \sum_{j} \int ... \left(\sin \theta'' \cos \varphi'' \sin \theta + \cos \theta'' \cos \theta \right) F_{ij} \left(k, k', \cos \theta'', \varepsilon \right) d\mathbf{k}'' =$$

= $\sin \theta \sum_{j} \int ... \sin \theta'' \cos \varphi'' F_{ij} \left(k, k', \cos \theta'', \varepsilon \right) d\mathbf{k}'' + \cos \theta \sum_{j} \int ... \cos \theta'' F_{ij} \left(k, k', \cos \theta'', \varepsilon \right) d\mathbf{k}''$ (II1.6)

Учитывая, что:

$$\sin \theta \sum_{j} \int ... \sin \theta'' \cos \varphi'' F_{ij} (k, k', \cos \theta'', \varepsilon) d\varphi'' d\theta'' dk'' =$$

$$= \sin \theta \sum_{j} \int ... \sin \theta'' F_{ij} (k, k', \cos \theta'', \varepsilon) d\theta'' dk'' \int_{0}^{2\pi} \cos \varphi'' d\varphi'' = 0 \qquad (\Pi 1.7)$$

Окончательно для (1.9) получено:

$$\phi_{1}^{(i)}(k) = \frac{\cos(\theta) \sum_{j} \int \phi_{1}^{(j)}(k'') \frac{\partial f_{0}^{(j)}(\varepsilon'')}{\partial \varepsilon} v'' \cos(\theta'') F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'', \varepsilon) d\mathbf{k}'' - \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos\theta}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos(\theta) \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') dk'}$$

$$= \frac{\sum_{j} \int \phi_{1}^{(j)}(k') \frac{\partial f_{0}^{(j)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos(\theta') F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v} \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') dk'$$

$$(\Pi 1.8)$$

Из (П1.8) видно, что неизвестная функция $\phi_1^{(i)}(k)$ зависит только от модуля волнового вектора.

Приложение 2

После подстановки в уравнения (1.26) – (1.28) функций (1.25), получаем:

$$\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} \Big[P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \varphi + P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \varphi \Big] + \frac{e}{\hbar} \cos \varphi + \Big[P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \varphi - P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \varphi \Big] \times \\ \times \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = \frac{\sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \sin \theta' \Big[P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \varphi' - P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \sin \varphi' \Big] F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \sin \theta} \Big] \\ - \frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} \Big[P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \varphi - P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \varphi \Big] + \frac{e}{\hbar} \sin \varphi + \Big[P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \varphi + P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \varphi \Big] \times \\ \times \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = \frac{\sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \sin \theta' \Big[P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \sin \varphi' + P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \varphi' \Big] F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \sin \theta} \Big] \\ P_{3}^{(i)}(\mathbf{k}, B) = \frac{\sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_{3}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos \theta}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \cos \theta} \Big]$$
(II2.3)

Далее необходимо рассмотреть интегралы вида $\int ... \sin \theta' \sin \varphi' d\mathbf{k}'$ и $\int ... \sin \theta' \cos \varphi' d\mathbf{k}'$. Аналогично преобразованиям, проведенным в Приложении 1, следует «повернуть» систему координат, чтобы направление вектора **k** в рассматриваемых интегралах совпадало с осью *z'*. Данный «поворот» можно осуществить в два шага: повернуть на угол φ вокруг оси *z*, затем вокруг оси *y* получившейся системы координат на угол θ . Матрица поворота, характеризующая данное преобразование представима в виде:

$$M = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & \sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta\cos\varphi & -\cos\theta\sin\varphi & \sin\theta \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ -\sin\theta\cos\varphi & \sin\theta\sin\varphi & \cos\theta \end{pmatrix} (\Pi 2.4)$$

Выражения, связывающие компоненты вектора k' в новой (x', y', z') и старой (x, y, z) системах координат, выглядят следующим образом:

$$\begin{pmatrix} k'_{x'} \\ k'_{y'} \\ k'_{z'} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} k'_{x} \\ k'_{y} \\ k'_{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k'_{x} \cos\theta \cos\varphi - k'_{y} \cos\theta \sin\varphi + k'_{z} \sin\theta \\ k'_{x} \sin\varphi + k'_{y} \cos\varphi \\ -k'_{x} \sin\varphi + k'_{y} \cos\varphi \\ -k'_{x} \sin\theta \cos\varphi + k'_{y} \sin\theta \sin\varphi + k'_{z} \cos\theta \end{pmatrix},$$
(II2.5)
$$k'_{x} = k'_{y'} \sin\varphi - \cos\varphi (k'_{z'} \sin\theta - k'_{x'} \cos\theta) \\ k'_{y} = k'_{y'} \cos\varphi + \sin\varphi (k'_{z'} \sin\theta - k'_{x'} \cos\theta) \\ k'_{z} = k'_{x'} \sin\theta + k'_{z'} \cos\theta$$
(II2.6)

Якобиан перехода, аналогично (П1.5) равен единице:

$$\left|\frac{\partial(x,y,z)}{\partial(x',y',z')}\right| = 1 \tag{II2.7}$$

С учетом (П2.4) – (П2.7) для первого интеграла получим:

$$\int \dots \sin \theta' \sin \varphi' F_{ij} (\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' = \int \dots (\sin \theta'' \sin \varphi'' \cos \varphi + \sin \varphi \cos \theta'' \sin \theta - \\ -\sin \varphi \sin \theta'' \cos \varphi'' \cos \theta) F_{ij} (\mathbf{k}, \mathbf{k}'', \varepsilon) d\mathbf{k}'' = \cos \varphi \int_{0}^{2\pi} \sin \varphi'' d\varphi'' \int \dots \sin \theta'' F_{ij} (\mathbf{k}, \mathbf{k}'', \varepsilon) d\theta'' dk'' \\ +\sin \varphi \sin \theta \int \dots \cos \theta'' F_{ij} (\mathbf{k}, \mathbf{k}'', \varepsilon) d\varphi'' d\theta'' dk'' - \sin \varphi \cos \theta \int_{0}^{2\pi} \cos \varphi'' d\varphi'' \times \\ \times \int \dots \sin \theta'' F_{ij} (\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}' = \sin \varphi \sin \theta \int \dots \cos \theta'' F_{ij} (\mathbf{k}, \mathbf{k}'', \varepsilon) d\varphi'' d\theta'' dk''$$
(II2.8)

Аналогично, для второго интеграла:

$$\int \dots \sin \theta' \cos \varphi' d\mathbf{k}' = \dots = \cos \varphi \sin \theta \int \dots \cos \theta'' F_{ij} \left(\mathbf{k}, \mathbf{k}'', \varepsilon \right) d\varphi'' d\theta'' dk''$$
(II2.9)

Тем самым, для (П2.1), (П2.2) получаем:

$$\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} \Big[P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \varphi + P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \varphi \Big] + \frac{e}{\hbar} \cos \varphi + \Big[P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \varphi - P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \varphi \Big] \times \\ \times \sum_j \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = \frac{\sum_j \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos \theta' \Big[P_1^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \varphi - P_2^{(i)}(\mathbf{k}', B) \sin \varphi \Big] F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v} \Big] \\ - \frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} \Big[P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \varphi - P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \varphi \Big] + \frac{e}{\hbar} \sin \varphi + \Big[P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sin \varphi + P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \cos \varphi \Big] \times \\ \times \sum_j \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = \frac{\sum_j \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos \theta' \Big[P_1^{(i)}(\mathbf{k}', B) \sin \varphi + P_2^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \varphi \Big] F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v} \Big]$$
(II2.11)

Уравнения (П2.10), (П2.11) должны быть справедливы при любом значении угла ϕ , поэтому следует приравнять слагаемые при $\sin \phi$ и $\cos \phi$. Из уравнения (П2.10) получим:

$$\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, B) - P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = -\frac{\sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v} \qquad (\Pi 2.12)$$

$$\frac{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v}{\frac{\partial \varepsilon}{\partial \varepsilon} v} = \frac{\sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v} (\Pi 2.13)$$

Аналогично, из уравнения (П2.11):

$$-\frac{eB}{\hbar c}\frac{v}{k}P_{1}^{(i)}(\mathbf{k},B)+P_{2}^{(i)}(\mathbf{k},B)\sum_{j}\int F_{ji}(\mathbf{k}',\mathbf{k},\varepsilon')d\mathbf{k}'=\frac{\sum_{j}\int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon}v'\cos\theta'P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}',B)F_{ij}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\varepsilon)d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}v}$$
(II2.14)

$$\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} P_{2}^{(i)}(\mathbf{k}, B) + \frac{e}{\hbar} + P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sum_{j} \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = \frac{\sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' \cos \theta' P_{1}^{(i)}(\mathbf{k}', B) F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v}$$
(II2.15)

Уравнения (П2.12) и (П2.14), также как и (П2.13) и (П2.15) одинаковы. Уравнение (П2.3) преобразуется аналогично уравнению (П1.1) (см. Приложение 1). Окончательно для (1.26) – (1.28):

$$\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) - P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sum_j \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = -\frac{\sum_j \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_2^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v} (\Pi 2.16)$$

$$\frac{eB}{\hbar c} \frac{v}{k} P_2^{(i)}(\mathbf{k}, B) + \frac{e}{\hbar} + P_1^{(i)}(\mathbf{k}, B) \sum_j \int F_{ji}(\mathbf{k}', \mathbf{k}, \varepsilon') d\mathbf{k}' = \frac{\sum_j \int \frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_1^{(i)}(\mathbf{k}', B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \varepsilon) d\mathbf{k}'}{\frac{\partial f_0^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v}$$
(II2.17)

$$P_{3}^{(i)}(\mathbf{k},B) = \frac{\sum_{j} \int \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon')}{\partial \varepsilon} v' P_{3}^{(i)}(\mathbf{k}',B) \cos \theta' F_{ij}(\mathbf{k},\mathbf{k}',\varepsilon) d\mathbf{k}' - \frac{e}{\hbar} \frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v}{\frac{\partial f_{0}^{(i)}(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} v \sum_{j} \int F_{ij}(\mathbf{k}',\mathbf{k},\varepsilon') d\mathbf{k}'}$$
(II2.18)

Список литературы

- Chu J., Sher A. Physics and Properties of Narrow Gap Semiconductors. New York : Springer, 2008.
- Chu J., Sher A. Device Physics of Narrow Gap Semiconductors. New York : springer, 2010.
- Rowe D.M., ed. CRC Handbook of Thermoelectrics. 1994, CRCPress : Boca Raton. 657.
- 4. Electronic archive. New semiconductor materials. Characteristics and properties. URL: <u>www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InSb/index.html</u>.
- Madelung O., Rössler U., Schulz M., eds. Group IV Elements, IV-IV and III-V Compounds. Part b - Electronic, Transport, Optical and Other Properties. Vol. 41A1b. 2002.
- Isaacson R.A. Electron Spin Resonance in n-Type InSb // Physical Review.
 1968. T. 169. № 2. C. 312-314.
- Yamaguchi S., Matsumoto T., Yamazaki J., Kaiwa N., Yamamoto A. Thermoelectric properties and figure of merit of a Te-doped InSb bulk single crystal // Applied Physics Letters. 2005. T. 87. № 20. — C. -.
- Litwin-Staszewska E., Szymańska W., Piotrzkowski R. The Electron Mobility and Thermoelectric Power in InSb at Atmospheric and Hydrostatic Pressures // physica status solidi (b). 1981. T. 106. № 2. — C. 551-559.
- Jung Y.J., Park M.K., Tae S.I., Lee K.H., Lee H.J. Electron transport and energy-band structure of InSb // Journal of Applied Physics. 1991. T. 69. № 5. — C. 3109-3114.

- Rode D.L. Electron Transport in InSb, InAs, and InP // Physical Review B.
 1971. T. 3. № 10. C. 3287-3299.
- Rogalski A., Piotrowski J. Intrinsic infrared detectors // Progress in Quantum Electronics. 1988. T. 12. № 2–3. — C. 87-289.
- Hulme K.F., Mullin J.B. Indium antimonide A review of its preparation, properties and device applications // Solid-State Electronics. 1962. T. 5. № 4. — C. 211-IN10.
- Хилсум К., Роуз-Инс А. Полупроводники типа AIIIBV. М : ИИЛ, 1963. — 324.
- Bowers R., Ure R.W., Bauerle J.E., Cornish A.J. InAs and InSb as Thermoelectric Materials // Journal of Applied Physics. 1959. T. 30. № 6. — C. 930-934.
- 15. Busch G., Steigmeier E. Wärmeleitfähigkeit, elektrische Leitfähigkeit, Hall-Effekt und Thermospannung von InSb // Helvetica Physica Acta. 1961. T.
 34. № 1. — C. 1-28.
- 16. Nilsson H.A., Caroff P., Thelander C., Larsson M., Wagner J.B., Wernersson L.-E., Samuelson L., Xu H.Q. Giant, Level-Dependent g Factors in InSb Nanowire Quantum Dots // Nano Letters. 2009. T. 9. № 9. — C. 3151-3156.
- Yao H., Yusuf Günel H., Blömers C., Weis K., Chi J., Grace Lu J., Liu J., Grützmacher D., Schäpers T. Phase coherent transport in InSb nanowires // Applied Physics Letters. 2012. T. 101. № 8. — C. 082103.

- Kulkarni J.P., Roy K. Technology Circuit Co-Design for Ultra Fast InSb Quantum Well Transistors // Electron Devices, IEEE Transactions on. 2008. T. 55. № 10. — C. 2537-2545.
- Obukhov S.A. A new type of low temperature conductivity in InSb doped with Mn // AIP Advances. 2012. T. 2. № 2. C. 022116.
- Rosker M., Shah J. DARPA's program on Antimonide Based Compound Semiconductors (ABCS). 2003. — 293.
- 21. Intel and QinetiQ Collaborate On Transistor Research, 2005. URL: http://www.intel.com/pressroom/archive/releases/2005/20050208corp.htm (дата обращения: 23.05.2014).
- 22. Cornett J.E., Rabin O. Thermoelectric figure of merit calculations for semiconducting nanowires // Applied Physics Letters. 2011. T. 98. № 18. C. 182104.
- 23. Mingo N. Thermoelectric figure of merit and maximum power factor in III– V semiconductor nanowires // Applied Physics Letters. 2004. T. 84. № 14. — C. 2652-2654.
- 24. Mingo N. Erratum: "Thermoelectric figure of merit and maximum power factor in III–V semiconductor nanowires" [Appl. Phys. Lett.84, 2652 (2004)] // Applied Physics Letters. 2006. T. 88. № 14. C. 149902.
- 25. Piotrowski J., Gawron W. Ultimate performance of infrared photodetectors and figure of merit of detector material // Infrared Physics & Technology. 1997. T. 38. № 2. C. 63-68.
- Anderson W.W. Absorption constant of Pb1-xSnxTe and Hg1-xCdxTe alloys // Infrared Physics. 1980. T. 20. № 6. C. 363-372.

- Beattie A.R., Landsberg P.T. Auger Effect in Semiconductors // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. 1959. T. 249. № 1256. — C. 16-29.
- 28. Casselman T.N., Petersen P.E. A comparison of the dominant Auger transitions in p-type (Hg,Cd)Te // Solid State Communications. 1980. T. 33. № 6. C. 615-619.
- 29. Blue M.D. Optical Absorption in HgTe and HgCdTe // Physical Review.
 1964. T. 134. № 1A. C. A226-A234.
- Kruse P.W. Indium Antimonide Photoconductive and Photoelectromagnetic Detectors // Semiconductors and Semimetals T. Volume 5. Willardson R.K., Albert C.B. : Elsevier, 1970. — C. 15-83.
- Маделунг О. Физика полупроводниковых соединений элементов III и V групп. М : Мир, 1967. 480.
- 32. Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М. : ИЛЛ, 1978.
- Аскеров Б.М. Электронные явления переноса в полупроводниках. М. : Наука, 1985.
- Roth L.M., Lax B., Zwerdling S. Theory of Optical Magneto-Absorption Effects in Semiconductors // Physical Review. 1959. T. 114. № 1. — C. 90-104.
- 35. Kane E.O. Band structure of indium antimonide // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1957. T. 1. № 4. C. 249-261.

- 36. Hilsum C., Barrie R. Properties of p-type Indium Antimonide: I. Electrical Properties // Proceedings of the Physical Society. 1958. T. 71. № 4. C. 676.
- Cunningham R.W., Harp E.E., Bullis W.M. Deep acceptor levels in indium antimonide. — Exeter, Inst. of Phys. and Phys. Soc., 1962. — 732.
- Hrostowski H.J., Morin F.J., Geballe T.H., Wheatley G.H. Hall Effect and Conductivity of InSb // Physical Review. 1955. T. 100. № 6. — C. 1672-1676.
- 39. Filipchenko A.S., Nasledov D.N. On the Mixed Mechanism of Electron Scattering in InSb Crystals // physica status solidi (b). 1967. T. 19. № 1. C. 435-439.
- 40. Byszewski P., Gronkowska M., Kołodziejczak J. Phonon Drag Effect in p-Type InSb // physica status solidi (b). 1965. T. 12. № 1. — C. 329-332.
- 41. Frederikse H.P.R., Mielczarek E.V. Thermoelectric Power of Indium Antimonide // Physical Review. 1955. T. 99. № 6. C. 1889-1890.
- 42. Ginter J., Szymańska W. The Measurements of Galvanomagnetic and Thermoelectric Properties of InSb-p // physica status solidi (b). 1963. T. 3.
 № 8. C. 1398-1407.
- 43. Puri S.M., Geballe T.H. Phonon Drag in n-Type InSb // Physical Review.
 1964. T. 136. № 6A. C. A1767-A1774.
- 44. Тамарин П.В., Шалыт С.С. Термоэдс n-InSb при низких температурах //
 Физика твердого тела. 1971. Т. 13. № 5. С. 1420-1425.

- 45. Тамарин П.В., Шалыт С.С., Ланг И.Г., Павлов С.Т. Гальваномагнитные и термомагнитные эффекты в p-InSb // Физика твердого тела. 1972. Т. 14. № 1. С. 60-73.
- 46. Гуревич В.Л., Образцов Ю.Н. Влияние увлечения электронов фононами на термомагнитные эффекты в полупроводниках // ЖЭТФ. 1957. Т. 32. С. 390.
- 47. Holland M.G. Phonon Scattering in Semiconductors From Thermal Conductivity Studies // Physical Review. 1964. T. 134. № 2A. — C. A471-A480.
- 48. Амирханов Х.И., Магомедов Я.Б. Теплопроводность антимонида индия в твердом и жидком состояниях // Физика твердого тела. 1965. Т. 7. № 2. С. 637-640.
- 49. Абрикосов А.А. Основы теории металлов. М. : Наука, 1987.
- 50. Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П. Физическая кинетика. Т. 10 М. : Физматлит, 2002.
- 51. Kubo R. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems // Journal of the Physical Society of Japan. 1957. T. 12. — C. 570.
- 52. Зубарев Д.Н. Неравновесная статистическая термодинамика. М. : Наука, 1971.
- Абрикосов А.А., Горьков Л.П., Дзялошинский И.Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. — М. : Физматгиз, 1962.

- 54. Боголюбов Н.Н. Проблемы динамической теории в статистической физике. М. Л. : Гостехиздат, 1946.
- 55. Van Hove L. The approach to equilibrium in quantum statistics: A perturbation treatment to general order // Physica. 1957. T. 23. № 1–5. C. 441-480.
- 56. Prigonine I., Résibois P. On the kinetics of the approach to equilibrium // Physica. 1961. T. 27. № 7. C. 629-646.
- 57. Luttinger J.M., Kohn W. Quantum Theory of Electrical Transport Phenomena. II // Physical Review. 1958. T. 109. № 6. — C. 1892-1909.
- Каданов Л., Бейм Г. Квантовая статистическая механика. М. : Мир, 1964.
- 59. Келдыш Л.В. Диаграммная техника для неравновесных процессов // ЖЭТФ. 1964. Т. 47. № 4. — С. 1515.
- 60. Бете Г., Зоммерфельд А. Электронная теория металлов. М. : Гостехиздат, 1938.
- Kohler M. Behandlung von Nichtgleichgewichtsvorgängen mit Hilfe eines Extremalprinzips // Zeitschrift für Physik. 1948. T. 124. № 7-12. — C. 772-789.
- Займан Д. Электроны и фононы. Теория явлений переноса в твердых телах. М. : ИИЛ, 1962.
- 63. Rees H.D. Calculation of distribution functions by exploiting the stability of the steady state // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1969. T. 30.
 № 3. C. 643-655.

- Rowe D.M., ed. Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano. 2005, CRC Press : Boca Raton. 1014.
- 65. Wood C. Materials for thermoelectric energy conversion // Reports on Progress in Physics. 1988. T. 51. № 4. C. 459.
- 66. Иоффе А.Ф. Полупроводниковые термоэлементы. М. Л. : АН СССР, 1960.
- 67. Сергеев Г.С. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2014612277. ССТЅ Solver., 2013.
- Boardman A.D., Fawcett W., Rees H.D. Monte Carlo calculation of the velocity-field relationship for gallium arsenide // Solid State Communications. 1968. T. 6. № 5. C. 305-307.
- 69. Fischetti M.V. Monte Carlo simulation of transport in technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blende structures. I. Homogeneous transport // Electron Devices, IEEE Transactions on. 1991. T. 38. № 3. C. 634-649.
- 70. Kunikiyo T., Takenaka M., Kamakura Y., Yamaji M., Mizuno H., Morifuji M., Taniguchi K., Hamaguchi C. A Monte Carlo simulation of anisotropic electron transport in silicon including full band structure and anisotropic impact-ionization model // Journal of Applied Physics. 1994. T. 75. № 1. C. 297-312.
- 71. Ertler C., Schürrer F. A multicell matrix solution to the Boltzmann equation applied to the anisotropic electron transport in silicon // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2003. T. 36. № 33. C. 8759.

- 72. Ertler C., Schürrer F., Koller W. A multigroup spline approximation in extended kinetic theory // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2002. T. 35. № 41. C. 8673.
- 73. Galler M., Schürrer F. A deterministic solution method for the coupled system of transport equations for the electrons and phonons in polar semiconductors // Journal of Physics A: Mathematical and General. 2004. T. 37. № 5. C. 1479-1497.
- 74. Alam M.A., Stettler M.A., Lundstrom M.S. Formulation of the Boltzmann equation in terms of scattering matrices // Solid-State Electronics. 1993. T. 36. № 2. C. 263-271.
- 75. Aubert J.P., Vaissiere J.C., Nougier J.P. Matrix determination of the stationary solution of the Boltzmann equation for hot carriers in semiconductors // Journal of Applied Physics. 1984. T. 56. № 4. C. 1128-1132.
- Fletcher K., Butcher P.N. An exact solution of the linearized Boltzmann equation with applications to the Hall mobility and Hall factor of n-GaAs // Journal of Physics C: Solid State Physics. 1972. T. 5. № 2. C. 212.
- 77. Howarth D.J., Sondheimer E.H. The Theory of Electronic Conduction in Polar Semi-Conductors // Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences. 1953. T. 219. № 1136. C. 53-74.
- Nougier J.P., Rolland M. Mobility, Noise Temperature, and Diffusivity of Hot Holes in Germanium // Physical Review B. 1973. T. 8. № 12. — C. 5728-5737.
- 79. Зеегер К. Физика полупроводников. М. : Мир, 1977.

- Press W.H., Teukolsky S.A., William S.A., Vetterling T., Flannery B.P. Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing. : Cambridge University Press, 1992.
- 81. Vassell M.O., Ganguly A.K., Conwell E.M. Angular Dependence of Matrix Elements for Scattering in III-V Compounds // Physical Review B. 1970. T.
 2. № 4. C. 948-950.
- 82. Орлов В.Г., Сергеев Г.С. Численное моделирование кинетических свойств антимонида индия // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. № 11.
 С. 2105-2111.
- Уиттекер Э.Т., Ватсон Д.Н. Курс современного анализа. М. : URSS, 2002.
- Самойлович А.Г. Термоэлектрические и термомагнитные методы превращения энергии. М. : ЛКИ, 2007.
- 85. Многоцелевой вычислительный комплекс НИЦ «Курчатовский институт». URL: <u>http://computing.kiae.ru/</u> (дата обращения: 21.01.2014).
- Szymańska W., Dietl T. Electron scattering and transport phenomena in small-gap zinc-blende semiconductors // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1978. T. 39. № 10. — C. 1025-1040.
- 87. Zawadzki W., Szymańska W. Elastic Electron Scattering in InSb-Type Semiconductors // physica status solidi (b). 1971. T. 45. № 2. C. 415-432.
- 88. Fan H.Y. Temperature Dependence of the Energy Gap in Semiconductors // Physical Review. 1951. T. 82. № 6. C. 900-905.

- Ehrenreich H. Electron scattering in InSb // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1957. T. 2. № 2. — C. 131-149.
- 90. Ehrenreich H. Transport of electrons in intrinsic InSb // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1959. T. 9. № 2. C. 129-148.
- 91. Oszwałldowski M., Zimpel M. Temperature dependence of intrinsic carrier concentration and density of states effective mass of heavy holes in InSb // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1988. T. 49. № 10. C. 1179-1185.
- 92. Pidgeon C.R., Groves S.H. Inversion-Asymmetry and Warping-Induced Interband Magneto-Optical Transitions in InSb // Physical Review. 1969. T. 186. № 3. C. 824-833.
- 93. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Теория деформационного потенциала для полупроводников со сложной зонной структурой // Физика твердого тела. 1960. Т. 2. № 9. — С. 2287-2300.
- 94. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. — М. : Наука, 1972.
- Szymańska W., Bogusławski P., Zawadzki W. Elastic Electron Scattering in Symmetry-Induced Zero-Gap Semiconductors // physica status solidi (b). 1974. T. 65. № 2. — C. 641-654.
- 96. Seiler D.G., Joseph T.J., Bright R.D. Effect of uniaxial stress on the longitudinal magnetophonon oscillations in n-InSb // Physical Review B. 1974. T. 9. № 2. — C. 716-722.

- 97. Bogusławski P. Nonpolar Scattering of Electrons by Optical Phonons in Small-Gap Semiconductors // physica status solidi (b). 1975. T. 70. № 1. C. 53-62.
- Fröhlich H., Pelzer H., Zienau S. XX. Properties of slow electrons in polar materials // Philosophical Magazine Series 7. 1950. T. 41. № 314. — C. 221-242.
- 99. Kranzer D. Mobility of holes of zinc-blende III–V and II–VI compounds // physica status solidi (a). 1974. T. 26. № 1. C. 11-52.
- 100. Wiley J.D. Mobility of Holes in III-V Compounds // Semiconductors and Semimetals T. Volume 10. Willardson R.K., Albert C.B. : Elsevier, 1975. - C. 91-174.
- 101. Askerov B.M., Gashimzade F.M. Damping of the Electron Spectrum and Quantum Theory of Galvanomagnetic Phenomena // physica status solidi (b). 1965. T. 10. № 2. C. 621-630.
- 102. Dingle R.B. XCIV. Scattering of electrons and holes by charged donors and acceptors in semiconductors // Philosophical Magazine Series 7. 1955. T. 46.
 № 379. C. 831-840.
- Chattopadhyay D., Queisser H.J. Electron scattering by ionized impurities in semiconductors // Reviews of Modern Physics. 1981. T. 53. № 4. — C. 745-768.
- 104. Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. М. : Наука, 1984.
- 105. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках. М. : Мир, 1986.
- 106. Conwell E., Weisskopf V.F. Theory of Impurity Scattering in Semiconductors // Physical Review. 1950. T. 77. № 3. — C. 388-390.
- 107. Falicov L.M., Cuevas M. Mobility of Electrons in Compensated Semiconductors. II. Theory // Physical Review. 1967. T. 164. № 3. — C. 1025-1032.
- 108. Ridley B.K. Reconciliation of the Conwell-Weisskopf and Brooks-Herring formulae for charged-impurity scattering in semiconductors: Third-body interference // Journal of Physics C: Solid State Physics. 1977. T. 10. № 10. — C. 1589-1593.
- Meyer J.R., Bartoli F.J. Phase-shift calculation of ionized impurity scattering in semiconductors // Physical Review B. 1981. T. 23. № 10. — C. 5413-5427.
- Бонч-Бруевич В.Л., Калашников С.Г. Физика полупроводников. М. : Наука, 1990.
- 111. Шифф Л. Квантовая механика. М. : ИИЛ, 1959.
- Bartoli F.J., Meyer J.R., Hoffman C.A., Allen R.E. Electron mobility in low-temperature Hg1-xCdxTe under high-intensity CO2 laser excitation // Physical Review B. 1983. T. 27. № 4. C. 2248-2263.
- Boardman A.D., Henry D.W. A Phase Shift Analysis of the Scattering of Carriers by Ionised Impurities in Non-Degenerate Semiconductors // physica status solidi (b). 1973. T. 60. № 2. — C. 633-639.
- Bogdanski P., Ouerdane H. Scattering states of coupled valence-band holes in a point-defect potential derived from variable-phase theory // Physical Review B. 2006. T. 74. № 8. — C. 085210.

- 115. Kim B.W., Majerfeld A. Analysis of ionized-impurity-scattering relaxation time and mobility by the phase-shift method for two interacting valence bands // Physical Review B. 1995. T. 51. № 3. — C. 1553-1561.
- 116. Ralph H.I. Scattering of holes from impurity potentials in the spherical-band approximation // Philips research reports. 1977. T. 21. C. 160-191.
- 117. Stern F. Friedel Phase-Shift Sum Rule for Semiconductors // Physical Review. 1967. T. 158. № 3. — C. 697-698.
- 118. Bate R.T., Baxter R.D., Reid F.J., Beer A.C. Conduction electron scattering by ionized donors in InSb at 80°K // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1965. T. 26. № 8. — C. 1205-1214.
- Litwin-Staszewska E., Jedrzejczak A., Porowski S., Filipchenko A.S. Transport phenomena in InSb doped with various impurities. — Warszawa, 1972. — 952-957.
- 120. Litwin-Staszewska E., Porowski S., Filipchenko A.A. Influence of pressure on the mobility in heavily doped n-type indium antimonide // physica status solidi (b). 1971. T. 48. № 2. — C. 519-524.
- Litwin-Staszewska E., Porowski S., Filipohenko A.A. Scattering on shortrange potentials in InSb // physica status solidi (b). 1971. T. 48. № 2. — C. 525-530.
- 122. Gorczyca I. Scattering on Short-Range Potentials in InSb. A Pseudopotential Calculation // physica status solidi (b). 1981. T. 103. № 2. — C. 529-533.
- Litwin-Staszewska E., Szymańska W. Scattering on Short-Range Potentials in Semiconductors with a Narrow Enerpy Gap // physica status solidi (b). 1976. T. 74. № 2. — C. K89-K92.

- 124. Ivey J.L. Use of orthogonalized-plane-wave bands and wave functions in the calculation of acoustic deformation potentials // Physical Review B. 1974. T.
 9. № 10. C. 4281-4285.
- 125. Ланлау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Т. 3 : Физматлит, 2002.
- 126. Яременко Н.Г., Потапов В.Т., Ивлева В.С. Электропроводность и эффект холла в сильно компенсированном n-InSb при низких температурах // Физика и техника полупроводников. 1972. Т. 6. № 7. — С. 1238-1247.
- 127. Meyer J.R., Bartoli F.J. Effect of random potential fluctuations on electron transport in n-type InSb // Physical Review B. 1985. T. 32. № 2. C. 1133-1145.
- 128. Meyer J.R., Bartoli F.J. Ionized-impurity scattering in the weak-screening limit // Physical Review B. 1985. T. 31. № 4. — C. 2353-2359.
- 129. Келдыш Л.В., Прошко Г.П. Инфракрасное поглощение в сильнолегированном германии // Физика твердого тела. 1963. Т. 5. — С. 3378-3389.
- 130. Гальперин Ю.С., Эфрос А.Л. Электронные свойства компенсированных полупроводников с коррелированным распределением примесей // Физика и техника полупроводников. 1972. Т. 6. № 6. С. 1081-1088.
- Шкловский Б.И., Эфрос А.Л. Электронные свойства легированных полупроводников. — М. : Наука, 1979.

- Bonch-Bruevich L.V. Some problems of the theory of the energy spectrum and charge carrier kinetics in disordered semiconductors. — Warszawa, 1972. — 502-507.
- 133. Khamidullina N.M. Carrier Mobility in Doped Nondegenerate Semiconductors // physica status solidi (b). 1983. T. 120. № 1. — C. 55-63.
- 134. Yanchev I.Y., Arnaudov B.G., Evtimova S.K. Electron mobility in heavily doped gallium arsenide due to scattering by potential fluctuations // Journal of Physics C: Solid State Physics. 1979. T. 12. № 19. — C. L765-L769.
- 135. Yussouff M., Zittartz J. A conductivity formula for impurity disorder systems // Solid State Communications. 1973. T. 12. № 9. — C. 959-962.
- 136. Zhumatii P.G. Intraband Conductivity and Thermopower of Semiconductors with Slowly Varying Gaussian Random Field // physica status solidi (b). 1976. T. 75. № 1. C. 61-72.
- 137. Nasledov D.N., Smetannikova Y.S., Tashkhodzhaev T.K. Electric properties of compensated p-type InSb // physica status solidi (a). 1973. T. 20. № 1. C. 101-108.
- 138. Гершензон Е.М., Куриленко И.Н., Литвак-Горская Л.Б., Рабинович Р.И. Подвижность электронов в чистом n-InSb в диапазоне температур 20-70 К // Физика и техника полупроводников. 1973. Т. 8. № 7. — С. 1501-1505.
- 139. Filipchenko A.S., Bolshakov L.P. Mobility of holes in p-InSb crystals // physica status solidi (b). 1976. T. 77. № 1. — C. 53-58.
- Schonwald H. Die Beweglichkeit der langsamen und schnellen Locher in Indiumantimonid // Z. Naturforsch. 1964. T. 19A. — C. 1276-1296.

- 141. Виноградова К.И., Галаванов В.В., Наследов Д.Н. Зависимость подвижности носителей тока от концентрации примеси в кристаллах InSb // Физика твердого тела. 1962. Т. 4. — С. 1673-1674.
- 142. Cunningham R.W., Gruber J.B. Intrinsic Concentration and Heavy-Hole Mass in InSb // Journal of Applied Physics. 1970. T. 41. № 4. C. 1804-1809.
- 143. Волокобинская Н.И., Галаванов В.В., Наследов Д.Н. Электрические и гальваномагнитные свойства InSb высокой чистоты // Физика твердого тела. 1959. Т. 1. — С. 755-760.
- 144. Filipchenko A.S., Nasledov D.N. Heavily doped crystals of n-type indium antimonide // physica status solidi (a). 1975. T. 27. № 1. C. 11-26.
- 145. Nag B.R., Dutta G.M. Low-temperature electron mobility in InSb // Journal of Applied Physics. 1977. T. 48. № 8. — C. 3621-3622.
- 146. Zawadzki W., Szymańska W. Electron scattering and transport phenomena in n-InSb // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 1971. T. 32. № 6. — C. 1151-1174.
- 147. Галаванов В.В. О механизме рассеяния дырок в InSb // Физика и техника полупроводников. 1970. Т. 4. № 5. С. 853-859.
- 148. Tanenbaum M., Maita J.P. Hall Effect and Conductivity of InSb Single Crystals // Physical Review. 1953. T. 91. — C. 1009-1010.
- 149. Howarth D.J., Jones R.H., Putley E.H. The Dependence of the Hall Coefficient of a Mixed Semiconductor upon Magnetic Induction as Exemplified by Indium Antimonide // Proceedings of the Physical Society. Section B. 1957. T. 70. № 1. — C. 124-135.

- 150. Madelung O., Weiss H. Die elektrischen Eigenschaften von Indiumantimonid II // Z. Naturforsch. 1954. T. 9a. — C. 527-534.
- 151. Угрин Ю.О., Шерегий Е.М. О вкладе различных типов носителей тока в явления переноса p-InSb // Физика и техника полупроводников. 1988. Т. 22. № 8. С. 1375-1380.
- 152. Могилевский Б.М., Чудновский А.Ф. Теплопроводность полупроводников. М. : Наука, 1972.
- 153. Zwerdling S., Kleiner W.H., Theriault J.P. Study of band structure and exitons in InSb by oscillatory magneto-absorption. Exeter, 1962. 455.
- 154. Litwin-Staszewska E., Jedrzejczak A., Porowski S., Filipchenko A.A. Transport phenomena in InSb doped with various impurities. — Warszawa, 1972. — 952–957.
- 155. Емельяненко О.В., Кесаманлы Ф.П., Наследов Д.Н. Зависимость эффективной массы электрона в n-InSb от концентрации носителей тока // Физика твердого тела. 1961. Т. 3. — С. 1161-1163.
- 156. Миргаловская М.С., Раухман М.Р., Ильченко Л.Н., Сорокина Н.Г. Термо-э.д.с антимонида индия р- и п- типа проводимости при комнатной температуре // Неорганические материалы. 1972. Т. 8. № 10. — С. 1751-1754.
- 157. Porowski S., Duracz A., Zukotyński S. The Effect of Hydrostatic Pressure on the Thermoelectric Power in Indium Antimonide // physica status solidi (b). 1963. T. 3. № 9. C. 1555-1562.

- 158. Большаков Л.П., Гаврушко В.В., Наследов Д.Н., Филиппченко А.С. Термоэдс в антимониде индия р-типа // Физика и техника полупроводников. 1968. Т. 2. — С. 1701.
- 159. Кокошкин В.А. Подвижность дырок в антимониде индия, легированном цинком и кадмием // Известия АН СССР, серия физическая. 1964. Т. 28. — С. 980.
- 160. Weiss H. Bestimmung der effektiven Massen in InSb und InAs aus Messungen der differentiellen Thermospannung // Z. Naturforsch. 1956. T. 11a. – C. 131-138.
- 161. Блум А.И., Рябцова Г.П. Исследование термоэлектрических свойств соединений InSb и GaAs в области плавления и жидкого состояния // Физика твердого тела. 1959. Т. 1. — С. 761-765.
- 162. Byszewski P., Kołodziejczak J., Zukotyński S. The Thermoelectric Power in InSb in the Presence of an External Magnetic Field // physica status solidi (b). 1963. T. 3. № 10. C. 1880-1884.
- Kolodziejczak J., Sosnowski L. Thermoelectromotive force and nernstettingshausen effect in InSb // Acta Physica Polonica. 1962. T. 21. — C. 399-413.
- 164. Stuckes A.D. Thermal Conductivity of Indium Antimonide // Physical Review. 1957. T. 107. № 2. — C. 427-428.
- 165. Sales B.C., Mandrus D., Williams R.K. Filled Skutterudite Antimonides: A New Class of Thermoelectric Materials // Science. 1996. T. 272. № 5266. C. 1325-1328.

- 166. Гольцман Б.М., Кудинов В.А., Смирнов И.А. Полупроводниковые термоэлектрические материалы на основе теллурида висмута (Bi2Te3).
 М. : Наука, 1972. 320.
- 167. Austin I.G. The Optical Properties of Bismuth Telluride // Proceedings of the Physical Society. 1958. T. 72. № 4. — C. 545.
- Ure R.W. High Nobility n-Type Bismuth Telluride. Exeter : Inst. of Phys. and the Phys. Soc., 1962. — 659-665.
- 169. Orlov V.G., Sergeev G.S. The key role of charge carriers scattering on polar optical phonons in semiconductors for thermoelectric energy conversion // Solid State Communications. 2013. T. 174. C. 34-37.