

УДК 621.315.592

Роман Дзумедзей, Тетяна Гевак, Юлія Бандура, Михайло Котик

*Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника,
м. Івано-Франківськ, Україна*

ОСОБЛИВОСТІ РОЗРАХУНКУ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ КРИСТАЛІВ PbTe:Sb(Bi)

Теплопровідність напівпровідників визначається різними механізмами переносу тепла. У такому випадку коефіцієнт теплопровідності можна представити як суперпозицію складових:

$$\chi = \chi_{el} + \chi_{gr} + \chi_{ph} + \chi_b, \quad (1)$$

тут χ_{el} – електронна, χ_{gr} – граткова, χ_{ph} – фотонна і χ_b – біполярна. Завдяки відносно малому значенню ширини забороненої зони PbTe, фотонною та біполярною складовими можна знехтувати.

Вимірювання теплопровідності у сильному магнітному полі є простим та надійним способом розділення теплопровідності на граткову (експериментально вимірюється граткова складова теплопровідності) та електронну ($\chi_{el} = \chi_0 - \chi_{gr}$, де χ_0 – повна теплопровідність, виміряна при відсутності магнітного поля) складові.

Розрахунок електронної складової проводився згідно закону Відемана-Франца:

$$\chi_{el} = L \sigma T, \quad (2)$$

де L – число Лоренца, яке для невідроджених напівпровідників визначається із виразу $L = (r + 2)(k_0 / e)^2$, r – параметр розсіювання – показник степеня у залежності довжини вільного пробігу від енергії, k_0 – стала Больцмана, e – заряд електрона, σ – коефіцієнт електропровідності, T – абсолютна температура.

Точний розрахунок граткової складової теплопровідності загалом є можливим, але вимагає вивчення енергетичної структури та ангармонічних процесів у кристалах та доброго узгодження з рівнянням Больцмана, що вимагає громіздких математичних розрахунків.

Враховуючи вищесказане стає зрозумілою наявність багатьох емпіричних чи напівемпіричних виразів для розрахунку граткової складової теплопровідності. Так, зокрема, ще в роботах Аскерова та інших дослідників були запропоновані вирази для розрахунку граткової складової теплопровідності:

$$\chi_{gr} = \frac{a}{\sqrt{T}}, \quad (3)$$

де a – коефіцієнт, який вибирається таким чином, щоб температурні залежності були близькими до експериментальних даних.

$$\chi_{\text{ел}} = \chi_0 \left(1 - \frac{\alpha^2 \sigma}{\chi_0} \right), \quad (4)$$

де α – коефіцієнт термо-е.р.с.

$$\chi_{\text{гр}} = \frac{2k_0 \chi_{\text{ел}}}{\alpha e - 2k_0}. \quad (5)$$

Вирази (3)-(5) згідно літературних даних дають добре узгодження із експериментом. В нашому розрахунку ми використовували вираз (5) для визначення граткової складової теплопровідності.

Таблиця 1 - Значення теплопровідності PbTe:Bi(Sb), залежно від вмісту домішки.

ат. %	77 К	200 К	300 К	450 К	600 К	800 К
	Bi					
0,25	20	9	8,8	–	–	–
0,5	17,3	8,8	8,5	–	–	–
1	12,4	11,1	8,3	–	–	–
2	–	–	12,4	10,1	9	6,5
Sb						
1	–	–	19,7	12,1	4,7	4,1
1,5	–	–	21,3	9,6	4,6	5,6
2	–	–	19,1	7	5,3	4,6

Розрахунки електропровідності та термо-е.р.с. були проведені для такого ж вмісту домішок ((0.25, 0.5, 1 та 2) ат. % Bi та сурми (1, 1.5 та 2) ат. % Sb) для цього ж інтервалу температур (77-800 К).

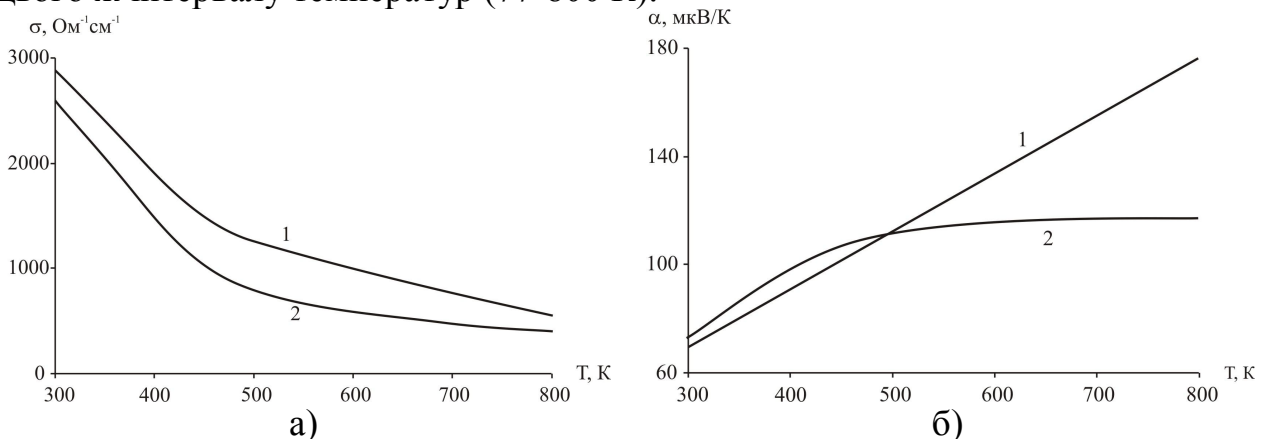


Рисунок 1 - Температурні залежності електропровідності σ (а) та термо-е.р.с. α (б): PbTe:Bi (1), PbTe:Sb (2).

Якщо порівнювати домішку вісмуту і сурми з однаковим вмістом (2 ат. %) видно, що PbTe:Bi володіє більшими значеннями електропровідності та термо-е.р.с. на цілому температурному діапазоні (рисунок 1). Із рисунка 1 (б) видно, що крива 1 (зразки PbTe:Bi) зростає лінійно, а крива 2 (зразки PbTe:Sb) виходить на насичення. Цю поведінку можна пояснити різною розчинністю легуючих домішок в пльомбум телуридi. З позиції вищої розчинності вісмуту можна пояснити і вищі значення електропровідності у PbTe:Bi (рисунок 1 (а)).